



**SELEKTIVE BESETZUNG
HOCHANGEREGETER Ar I -ZUSTÄNDE
DURCH EINEN ZWEELEKTRONENTRANSFER
ZWISCHEN Cu UND Ar III
IN EINER EZR-MIKROWELLENENTLADUNG**

**Dissertation zur Erlangung des Grades
eines Doktors der Naturwissenschaften
der Fakultät für Physik und Astronomie
an der Ruhr-Universität Bochum**

**von
Martin Jogwich
aus Essen**

Bochum 1989

Dissertation eingereicht am 3. 5. 1989

Tag der mündlichen Prüfung 20. 6. 1989

Referent Prof. Dr. K. Wiesemann

Korreferent Prof. Dr. H.J. Kunze

INHALTSVERZEICHNIS

1.	EINLEITUNG	1
2.	THEORETISCHE ÜBERLEGUNGEN	
2.1	Modelle zur Beschreibung von Ein- und Mehrelektronen-Transferprozessen	
2.1.1	Vorbemerkung	3
2.1.2	Klassisches Modell der erlaubten Übergänge	4
2.1.3	Erweitertes klassisches Modell (ECB-Modell)	6
2.1.4	Anwendungen des ECB-Modells auf Argon-Kupfer-Stoßsysteme	10
2.1.5	Quantenmechanische Beschreibung von Zuständen zweiatomiger Moleküle	17
2.2	Bestimmung des Zweielektronentransfer-Ratenkoeffizienten unter Verwendung eines modifizierten Koronamodells	
2.2.1	Aufstellung von Bilanzgleichungen für angeregte atomare Zustände	34
2.2.1.1	Elektronenstöße	35
2.2.1.2	Photonenstöße, Photoionisierung	35
2.2.1.3	Rekombination	36
2.2.1.4	Strahlungsübergänge	36
2.2.1.5	Umladungsstöße	37
2.2.2	Übergangswahrscheinlichkeiten im neutralen Argon und Kupfer	38
2.2.2.1	Übergangswahrscheinlichkeiten im neutralen Kupfer	39
2.2.2.2	Übergangswahrscheinlichkeiten im neutralen Argon	41
2.2.3	Anregung durch Elektronenstöße	
2.2.3.1	Vorbemerkung	48
2.2.3.2	Berechnung von Elektronenstoßanregungs-Wirkungsquerschnitten	48
2.2.3.3	Die Elektronenenergie-Verteilungsfunktion $F(E)$	54
2.2.4	Bestimmung des Ratenkoeffizienten für einen Zweielektronentransfer zwischen CuI und ArIII	55

3.	APPARATIVER AUFBAU	
3.1	Elektron-Zyklotron-Resonanz-Entladung	61
3.2	VUV-Spektrometer und MeBelektronik	63
4.	SPEKTROSKOPISCHE MESSUNGEN AN EINEM EZR-PLASMA	
4.1	Vorbemerkung	68
4.2	Meßbedingungen	69
4.3	Messungen von ArI-VUV- und CuI-Resonanzlinien-Intensitäten	71
4.4	Bestimmung des Ratenkoeffizienten eines Zweielektronentransfers zwischen CuI und ArIII	88
4.5	Fehlerbetrachtung und Ausblick	93
5.	ZUSAMMENFASSUNG	96
6.	LITERATURVERZEICHNIS	98
7.	ABBILDUNGS- UND TABELLENVERZEICHNIS	102

1. EINLEITUNG

Umladungs- (oder auch Transfer-)reaktionen zwischen mehrfach geladenen Ionen und neutralen Atomen sind von Bedeutung für verschiedene Bereiche physikalischer Grundlagenforschung. In heißen Fusionsplasmen beispielsweise werden Elektronentransferreaktionen zwischen Neutralen und Verunreinigungsionen, die durch Plasma-Wand-Wechselwirkung entstehen, beobachtet. Durch diese Umladungen werden hochangeregte Ionenzustände erzeugt, die schließlich durch Photonenemission einen Energieverlust durch Linienstrahlung im Fusionsplasma verursachen (s. z. B. Drake, Moos 1980). Für die Laserforschung sind Umladungsreaktionen interessant, die zu einer selektiven Besetzung einzelner angeregter Zustände und im Spezialfall zu einer Besetzungsinversion führen (s. z. B. Gilbert 1983).

Eine quantitative Bewertung von Stoßreaktionen ist jedoch oft nicht möglich, da für viele Stoßprozesse die Ratenkoeffizienten und Wirkungsquerschnitte nicht oder nur ungenau bekannt sind. Dies gilt z.B. auch für Stoßprozesse in Argon/Kupfer-Gasentladungen, die in der Technik für Glasbeschichtungen verwendet werden. Für kein Argon/Kupfer-Stoßsystem sind experimentelle oder theoretische Stoßwirkungsquerschnitte bekannt. Insbesondere für Ar/Cu-Stoßsysteme, in denen ein Stoßpartner neutral ist, ist sowohl die experimentelle als auch die theoretische Bestimmung extrem schwierig.

Eine Möglichkeit zur Bestimmung von Ratenkoeffizienten dieser Stöße bieten spektroskopische Untersuchungen an der Bochumer Elektron-Zyklotron-Resonanz-Entladung: Bei instabilen Plasmabedingungen wird dort das Plasma auf eine Kupfer-Resonatorwand getrieben, was zur Zerstäubung des Wandmaterials und zur Erhöhung des Kupfergehaltes der Entladung führt. In dieser "unfreiwillig" erzeugten Argon/Kupfer-Entladung wurde parallel mit dem Anstieg der Kupferdichte ein Intensitätsanstieg zweier Argon-Linienpaare bei 80.6 nm und 81.6 nm beobachtet, der auf eine selektive Besetzung der hochangeregten ArI-Zustände $6d/8s [3/2]^0$ und $5d/7s [3/2]^0$ durch einen Zweielektronentransfer zwischen Kupferatomen und Ar^{2+} -Ionen hinweist. Eine quantitative Analyse des zugrundeliegenden Mechanismus ist das Ziel dieser Arbeit.

In Kapitel 2.1 werden anhand semiklassischer und quantenmechanischer Modelle verschiedene Elektronentransferprozesse zwischen Argon- und Kupferionen diskutiert, die zur Besetzung der obengenannten hochangeregten ArI-Zustände führen können. Insbesondere werden dabei Stoßprozesse untersucht, bei denen ein Zweielektronentransfer vom neutralen Kupfer für die Anregung sorgt.

Um Ratenkoeffizienten für diese Prozesse zu bestimmen, werden in Abschnitt 2.2 Bilanzgleichungen für die beteiligten Zustände in den Systemen ArI und CuI aufgestellt. Die in die Gleichungen eingehenden atomaren Übergangswahrscheinlichkeiten A_{ji} und Wirkungsquerschnitte σ_{ij} für Elektronenstöße sind nur sehr unvollständig bekannt. In den Abschnitten 2.2.2 und 2.2.3 wird besprochen, wie für diese unbekannten Größen Schätzwerte ermittelt werden und welche Unsicherheit dies für weitere Rechnungen bedeutet. Unter Berücksichtigung aller Prozesse, die im vorliegenden EZR-Plasma für Be- bzw. Entvölkerung von angeregten Zuständen eine Rolle spielen, wird im Abschnitt 2.2.4 eine Formel zur Bestimmung des Zweielektronentransfer-Ratenkoeffizienten R_{trans} aufgestellt. Die Besetzungsdichten der untersuchten Zustände im ArI und CuI, die in diese Formel eingehen, werden aus Linienintensitäten bestimmt, die mit einem absolut kalibrierten Monochromator gemessen wurden. Die verwendete VUV-Diagnostik sowie die Mikrowellenentladung selbst werden in Kapitel 3 näher vorgestellt.

In Kapitel 4 werden die Ergebnisse der spektroskopischen Messungen an ArI- und CuI-VUV-Resonanzlinien dargestellt und schließlich der Ratenkoeffizient R_{trans} bestimmt.

2. THEORETISCHE ÜBERLEGUNGEN

2.1 MODELLE ZUR BESCHREIBUNG VON EIN- UND MEHR-ELEKTRONEN-TRANSFERPROZESSEN

2.1.1 Vorbemerkung

In diesem Abschnitt sollen Stöße zwischen zwei Ionen $A^{z_A^+}$ und $B^{z_B^+}$ betrachtet werden, die zu einem Transfer von m Elektronen gemäß Gleichung (1) führen:



Bei positivem Energiedefekt Q liegt ein exothermer Stoßprozeß vor. Bei den betrachteten Stößen ist die Relativgeschwindigkeit v_r beider Stoßpartner klein gegen die Bahngeschwindigkeit v_0 der am Umladungsprozeß beteiligten Elektronen. In diesem Fall ist bei jedem Kernabstand R eine Umordnung der Elektronenhüllen beider Ionen auf den Gleichgewichtszustand möglich. Ist derjenige Kernabstand R_c bekannt, an dem ein bestimmter Ein- oder Mehrelektronen-Transferprozeß mit maximaler Wahrscheinlichkeit stattfindet, kann direkt der Wirkungsquerschnitt $\sigma \sim R_c^2$ dieses Prozesses berechnet werden.

In Abschnitt 2.1.2 soll zunächst das Modell der klassisch erlaubten Übergänge von Bohr und Lindhard (1954) vorgestellt werden, durch das reine Einelektronen-Transferprozesse beschrieben werden können. Jeder Mehrelektronen-Einfangprozeß läßt sich in diesem Modell jedoch wiederum nur als Folge einzelner Einelektronen-Transferprozesse darstellen. Deshalb wird in Abschnitt 2.1.3 eine Erweiterung dieses klassischen Modells, das sog. "Extended Classical Barrier Model" (ECB-Modell) von Niehaus (1986), vorgestellt, mit dessen Hilfe man sowohl die Wirkungsquerschnitte von Einelektronen- als auch von beliebigen Mehrelektronen-Transferprozessen bestimmen kann. Eine Anwendung dieses erweiterten Modells auf spezielle Argon-Kupfer-Stoßsysteme wird in Abschnitt 2.1.4 dargestellt.

In Abschnitt 2.1.5 soll als Alternative zur semiklassischen Betrachtung die quantenmechanische Beschreibung des Quasimoleküls ($A^{z_A^+} B^{z_B^+}$) vor dem Stoß und des Quasimoleküls ($A^{(z_A-m)^+} B^{(z_B+m)^+}$) nach dem Stoß betrachtet werden. Man erhält für beide Systeme Potentialkurven, deren Verhalten an ihren Kreuzungspunkten R_{ci} Aufschluß über den Wirkungsquerschnitt des jeweiligen Transfers gibt.

2.1.2 Klassisches Modell der erlaubten Übergänge

Ein Projektilion $A^{z_A^+}$ nähere sich von einem großen Kernabstand R auf einer klassischen Bahn einem Targetionenrumpf, an den das am Transfer aktiv beteiligte Elektron gebunden sei. Die klassische Bewegung erfolge entlang der Kernverbindungsachse, die hier als x -Achse festgelegt wird.

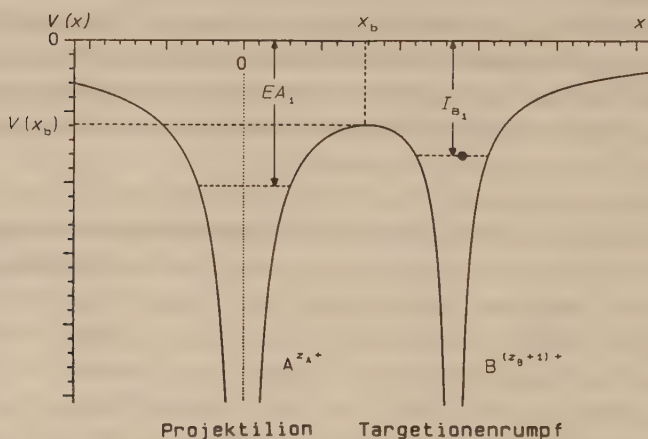


Abb. 1: Schematischer Potentialverlauf $V(x)$ beim Stoß eines Projektilions $A^{z_A^+}$ mit einem Targetion $B^{z_B^+}$

(EA_1 = atomarer Zustand des Projektilions,

I_{B1} = Bindungsenergie des aktiven Elektrons)

Bei Annäherung beider Stoßpartner entsteht durch Überlagerung der Coulomb-Potentiale von A^{z_A+} und $B^{(z_B+1)+}$ ein gemeinsames Potential $V(x)$:

$$V(x) = - \frac{z_A e^2}{4 \pi \epsilon_0 |x|} - \frac{z_B e^2}{4 \pi \epsilon_0 |R-x|} \quad (2)$$

Die Potentialbarriere hat zwischen den Kernen an der Stelle $x = x_b$ einen Sattelpunkt mit $V(x) = V_b$:

$$x_b = R / \left[1 + \sqrt{z_B / z_A} \right] \quad (3)$$

und

$$V_b = - \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 |R|} \left(z_A + z_B + 2 \sqrt{z_A z_B} \right) \quad (4)$$

Bei der Annäherung des Projektilions an das Targetion wird zum einen die Potentialbarriere V_b immer weiter abgesenkt, zugleich erfährt aber auch die Bindungsenergie I_{B_1} des aktiven Elektrons durch das Coulomb-Potential des Projektilions eine Absenkung. Die Bedingung für einen klassisch erlaubten Übergang eines Elektrons (mit der Bindungsenergie I_{B_1}) vom Targetion zum Projektilion beim Kernabstand $R = R_1$ lautet somit:

$$V_b = - I_{B_1} - \frac{z_A e^2}{4 \pi \epsilon_0 R_1} \quad (5)$$

Dieser klassische Übergang erfolgt an der Stelle

$$R_1 = - \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0} * \frac{(z_A + 2 \sqrt{z_A z_B})}{I_{B_1}} \quad (6)$$

Der Einfang des Elektrons erfolgt in einen atomaren Zustand EA_1 des Projektilions, der wiederum durch das Coulomb-Potential des Targetions abgesenkt ist. Wird nun neben der Bedingung (5) die Energieresonanz des Übergangs gefordert (Ryufuku et al 1980), ergibt sich damit beim Kernabstand $R = R_1$ eine weitere Übergangsbedingung:

$$- I_{B_1} - \frac{z_A e^2}{4 \pi \epsilon_0 R_1} = - EA_1 - \frac{z_B e^2}{4 \pi \epsilon_0 R_1} \quad (7)$$



z_A und z_B sind dabei die effektiven Kernladungszahlen von Projektilion und Targetion, wie sie vom aktiven Elektron während des Stoßes "gesehen" werden. Für große Kernabstände ergibt sich aus (7) die Definition des Energiedefektes der Reaktion:

$$Q_1 = EA_1 - I_{B_1} . \quad (8)$$

Für die für diese Arbeit interessanten Einelektronen-Transferprozesse ergeben sich aus den obenstehenden klassischen Rechnungen folgende Werte:

Stoßprozeß	R_1 / a_0
$Ar^+ + Cu \rightarrow Ar + Cu^+ + Q$	6.476
$Ar^{2+} + Cu \rightarrow Ar^+ + Cu^+ + Q$	13.489
$Ar^+ + Cu^+ \rightarrow Ar + Cu^{2+} + Q$	8.047

Tabelle 1 : Kernabstände R_1 klassisch erlaubter Einelektronenübergänge
($a_0 = 1$. Bohrscher Radius, Q = Energiedefekt)

Der Wirkungsquerschnitt für jeden dieser Einelektronen-Austauschprozesse ist

$$\sigma = P \pi R_1^2 . \quad (9)$$

P ist dabei die Einfangwahrscheinlichkeit, die mit Hilfe von Potentialkurvenrechnungen (s. folgenden Abschnitt) für jeden speziellen Einelektroneneinfang berechnet werden kann.

2.1.3 Erweitertes klassisches Modell (ECB-Modell)

Eine Erweiterung des klassischen Modells ist das sogenannte Extended Classical Barrier-Modell (Niehaus 1986), mit dem Wirkungsquerschnittsberechnungen von Transferprozessen möglich sind, an denen beliebig viel Elektronen beteiligt sind. In diesem Modell werden die Annäherung und das Auseinanderlaufen von Targetion und Projektilion getrennt betrachtet:

Bei Annäherung der beiden Stoßpartner ist beim Kernabstand R_1^{1n} für das erste Elektron des Targetions mit der Bindungsenergie I_{B_1} die Bedingung (5) aus Abschnitt 2.1.2 für einen klassischen Übergang erfüllt. Bei weiterer Annäherung $R < R_1^{1n}$ gelten die entsprechenden Übergangsbedingungen für das i-te Elektron mit der Bindungsenergie I_{B_i} beim Kernabstand R_1^{in} . Im Gegensatz zum reinen klassischen Modell wird jedoch beim erweiterten klassischen Modell angenommen, daß jedes dieser freien Elektronen in einen sog. quasimolekularen Zustand übergeht. Bei einer Annäherung von Target- und Projektilion auf R_n sind also n Elektronen in n quasimolekularen Zuständen gebunden. Es wird ferner angenommen, daß diese molekularen Elektronen keinerlei Abschirmung der Projektilladung bewirken und auch untereinander keine Wechselwirkung haben.

Beim anschließenden Auseinanderlaufen der Stoßpartner werden erneut Kernabstände R_1^{out} erreicht, bei denen entweder ein Einfang zum Projektilion (Symbol "1") oder ein Wiedereinfang zum Targetion (Symbol "0") möglich ist.

Der Ablauf eines stufenweisen Mehrelektronen-Transferprozesses wird durch einen sogenannten "capture string" charakterisiert: So bedeutet der string (j) = (1 0 0 1 0) z. B., daß fünf Elektronen beim Zusammenlaufen von Target- und Projektilion quasimolekular geworden sind, jedoch nur das 1. und 4. Elektron vom Projektilion beim Auseinanderlaufen eingefangen worden sind.

Weiterhin geht das Modell davon aus, daß sowohl ein Einfang eines Elektrons zum Projektilion A^{z_A+} als auch ein Wiedereinfang zum Targetion näherungsweise in wasserstoffähnliche Zustände erfolgt (s. Gleichungen (10) und (11)):

$$EA_{n_1} = - \frac{h c R_H z_A^2}{n_1^2} , \quad (10)$$

$$EB_{m_1} = - \frac{h c R_H z_B^2}{m_1^2} . \quad (11)$$

Dabei ist h das Plancksche Wirkungsquantum, R_H die Rydberg-Konstante ($1.0974 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$) und c die Lichtgeschwindigkeit. z_A und z_B sind die Kernladungen von Projektil- bzw. Targetion im Augenblick vor dem Einfang des Elektrons, n_1 und m_1 sind effektive Quantenzahlen.

EA_{n_1} und EB_{m_1} ergeben sich aus den Bedingungen für einen Übergang des i -ten Elektrons in den quasimolekularen Zustand bei R_1^{in} und den Bedingungen für einen Übergang in einen gebundenen Zustand bei R_1^{out} :

$$-I_{B_1} - \frac{z_A^{in} e^2}{4\pi\epsilon_0 R_1^{in}} = -EA_{n_1} - \frac{z_B^{out} e^2}{4\pi\epsilon_0 R_1^{out}}, \quad (12)$$

$$-I_{B_1} - \frac{z_A^{in} e^2}{4\pi\epsilon_0 R_1^{in}} = -EB_{m_1} - \frac{z_A^{out} e^2}{4\pi\epsilon_0 R_1^{out}}. \quad (13)$$

Der Zustand mit der effektiven Quantenzahl n_1 sei bez. des Drehimpulses n_1^2 -fach entartet, der Zustand m_1 entsprechend m_1^2 -fach. Es sei für den string (j) nur ein Transfer in einer dieser beiden Zustände möglich. Unter Berücksichtigung der Entartung der beiden Zustände ist damit die Wahrscheinlichkeit $P_1^{(j)}$ für einen Elektroneneinfang zum Projektilion (also in den Zustand n_1) unter Verwendung der Gleichungen (10) und (11):

$$P_1^{(j)} = \frac{(n_1^{(j)})^2}{(n_1^{(j)})^2 + (m_1^{(j)})^2}. \quad (14)$$

Damit ergeben sich für die Fälle, die im Stoßsystem $Ar^{n+} + Cu$ interessant sind, folgende Wirkungsquerschnitte (Mack 1987):

$$\sigma^{(1)} = P_1^{(1)} \pi (R_1^2 - R_2^2), \quad (15)$$

$$\sigma^{(10)} = (1 - P_2) P_1^{(10)} \pi R_2^2, \quad (16)$$

$$\sigma^{(01)} = P_2 (1 - P_1^{(01)}) \pi R_2^2, \quad (17)$$

$$\sigma^{(11)} = P_2 P_1^{(11)} \pi R_2^2. \quad (18)$$

Die Energiedefekte der einzelnen Einfangreaktionen berechnen sich in gleicher Weise wie in Gleichung (8): Für einen Einfang des Elektrons zum Projektilion gilt:

$$Q_1 = EA_1 - I_{B_1}. \quad (19)$$

Für einen Wiedereinfang zum Targetion gilt:

$$Q_1 = EB_1 - I_{B_1} . \quad (20)$$

Der Gesamtenergiedefekt $Q_0^{(j)}$ eines speziellen "capture string" ist damit

$$Q_0^{(j)} = \sum_{i=1}^n Q_i . \quad (21)$$

In diesem erweiterten klassischen Modell müssen nun noch dynamische Effekte berücksichtigt werden, da bei höheren Stoßgeschwindigkeiten v_r auch vermehrt Stoßprozesse beobachtet werden, bei denen nicht streng die Energieresonanz (s. Gleichungen (12) und (13)) erfüllt ist (s. z. B. Mack 1987). Dieser Effekt läßt sich mit der Energieunschärfe der zeitlich abhängigen Potentialbarriere $V_b(t)$ erklären. Es gilt:

$$\Delta V_b \Delta t = \hbar . \quad (22)$$

Aus klassischen Betrachtungen ergibt sich die Unschärfe

$$\Delta V_b^{\min} = \left(\hbar \left| \frac{\partial V_b}{\partial r} \right| v_r \right)^{1/2} . \quad (23)$$

Damit ergibt sich ebenfalls für das i-te Elektron eine Energieunschärfe ΔE_i der Energie E_i des atomaren Zustandes, in den das Elektron eingefangen wird:

$$\Delta E_i = \left[\left(\Delta V_b^{\text{in}} \right)^2 + \left(\Delta V_b^{\text{out}} \right)^2 \right]^{1/2} . \quad (24)$$

Für den Fall des Elektroneneinfangs zum Projektilion gilt $E_i = EA_{n_1}$; die Energieunschärfe dieses Zustandes ist dann $\Delta E_i = \Delta EA_{n_1}$. Wenn ein Wiedereinfang durch das Targetion erfolgt, gilt $E_i = EB_{m_1}$ und entsprechend $\Delta E_i = \Delta EB_{m_1}$. Die Wahrscheinlichkeit für den Einfang des i-ten Elektrons in den atomaren Zustand E_i läßt sich wegen dieser Energieunschärfe als eine Gauß-Verteilung darstellen, die um E_i zentriert ist:

$$P_i^{(j)}(Q) = \left(\Delta E_i \sqrt{\pi} \right)^{-1} * \exp \left(- \left(\frac{Q - E_i}{\Delta E_i} \right)^2 \right) . \quad (25)$$

Mit Gleichung (25) wird ein sog. Einfangfenster ("capture window") definiert. Die Faltung der Einfangsfenster aller Elektronen, die am gesamten Transfer beteiligt sind, ergibt schließlich ein Reaktionsfenster für einen speziellen "capture string" (j), das ebenfalls die Gestalt einer Gauß-Verteilung hat:

$$P^{(j)}(Q) = (\Delta Q^{(j)} \sqrt{\pi})^{-1} * \exp \left(- \left(\frac{Q - Q_0^{(j)}}{\Delta Q^{(j)}} \right)^2 \right) . \quad (26)$$

Dabei ist

$$\Delta Q^{(j)} = \left[\sum_{i=1}^n (\Delta E_i)^2 \right]^{1/2} . \quad (27)$$

Schließlich erhält man für den "capture string" (j) den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma^{(j)}(Q) = \sigma^{(j)} * P^{(j)}(Q) . \quad (28)$$

2.1.4 Anwendungen des ECB-Modells auf Argon-Kupfer-Stoßsysteme

Für diese Untersuchung sind speziell diejenigen Stoßprozesse von Argon- und Kupferionen von Interesse, die zu einer selektiven Besetzung der ArI-Zustände $[^2P_{3/2}](nl)[3/2]^o$ führen können. Die Notation dieser Zustände wird in den folgenden Kapiteln der Einfachheit halber meist mit $Ar^*(nl)$ oder $(nl)[3/2]^o$ abgekürzt. Eine nähere Beschreibung der ArI-Atomkonfiguration erfolgt in Abschnitt 2.2.2.2.

Stoßprozeß	Energiedefekt Q / eV
$Ar^+ + Cu \rightarrow Ar^*(4s) + Cu^+$	-3.588
$Ar^+ + Cu \rightarrow Ar^*(5d) + Cu^+$	-7.153
$Ar^+ + Cu \rightarrow Ar^*(7s) + Cu^+$	-7.15
$Ar^+ + Cu \rightarrow Ar^*(6d) + Cu^+$	-7.338
$Ar^+ + Cu \rightarrow Ar^*(8s) + Cu^+$	-7.33

Tabelle 2: Energiedefekte von Stoßreaktionen $Ar^+ + Cu \rightarrow Ar^*(nl) + Cu^+$
(abgekürzte Notation: $Ar^*(nl) \equiv Ar^*(3p^5 nl [3/2]^o)$)

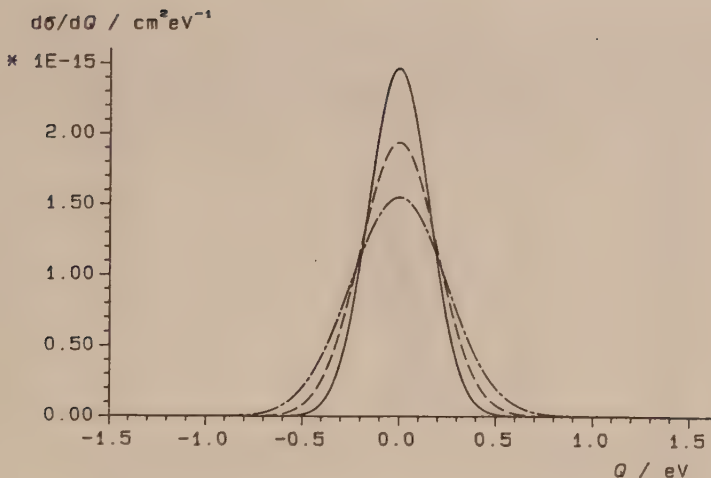


Abb. 2: Reaktionsfenster eines Einelektronen-Transferprozesses
 $\text{Ar}^+ + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^* + \text{Cu}^+$ (ECB-Modell) für die Stoßenergien
 1 eV (———), 3 eV (- - - -) und 10 eV (— · — ·)

Mit Hilfe eines von Koslowski entwickelten Rechenprogramms (Koslowski 1988, a), das von dem in Abschnitt 2.1.3 beschriebenen ECB-Modell Gebrauch macht, lassen sich Wirkungsquerschnitte und Reaktionsfenster auch von denjenigen Stoßprozessen ermitteln, an denen Argon- und Kupferionen beteiligt sind. Die Rechnungen für die für diese Arbeit interessanten Stoßsysteme ergeben, daß der Wirkungsquerschnitt des Einelektronentransfers $\text{Ar}^+ + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^* + \text{Cu}^+$ nur für sehr kleine Energiedefekte maximal ist (s. Abb. 2). Tabelle 2 zeigt aber, daß die Reaktionen, die zur Besetzung der hochangeregten ArI -Zustände führen würden, stark endotherm wären und damit weit außerhalb des errechneten Reaktionsfensters lägen. Ein Einelektronentransfer als Ursache für eine selektive Besetzung hochangeregter Argon-Zustände ist damit auszuschließen.

Als nächstes müssen nun Zweielektronen-Transferprozesse betrachtet werden. Diese Prozesse können aus zwei aufeinanderfolgenden Einelektronen-Transferprozessen zusammengesetzt sein (Koslowski 1988, b). In unserem speziellen Fall muß also die Reaktionsfolge $\text{Ar}^{2+} + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^+ + \text{Cu}^{+(*)} \rightarrow \text{Ar}^*(n1) + \text{Cu}^{2+}$ diskutiert werden.

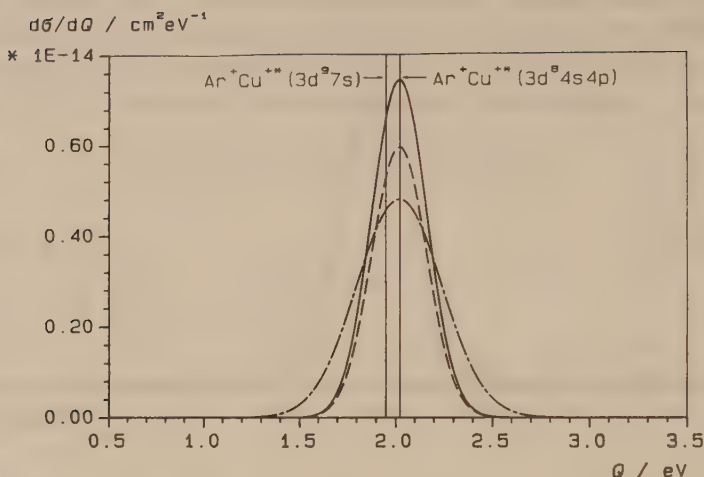


Abb. 3: Reaktionsfenster eines Einelektronen-Transferprozesses

$\text{Ar}^{2+} + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^+ + \text{Cu}^{+(*)}$ (ECB-Modell) für die Stoßenergien
1 eV (———), 3 eV (- - - -) und 10 eV (— · — ·)

Das Reaktionsfenster für den ersten Schritt dieses zweistufigen Zweielektronentransfers ist um $Q = 2.02$ eV zentriert (s. Abb. 3). Dadurch können diejenigen $\text{Ar}^+ \text{Cu}^{+(*)}$ -Zustände selektiert werden, in die mit großer Wahrscheinlichkeit ein Einelektronentransfer erfolgen kann. Im nächsten Kapitel wird mit Hilfe von Potentialkurvenrechnungen diskutiert, ob von diesen Zuständen ein Übergang zu den Zuständen $\text{Ar}^+ (n1) \text{Cu}^{2+}$ möglich ist.

Es besteht auch die Möglichkeit, daß ein einstufiger Zweielektronen-Transferprozeß $\text{Ar}^{2+} + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^+ (n1) + \text{Cu}^{2+}$ für die Besetzung der ArI-Zustände verantwortlich ist. Die Rechnungen mit dem ECB-Modell ergeben, daß dieser Prozeß für sehr kleine Energiedefekte Q mit maximaler Wahrscheinlichkeit ablaufen kann. Auf Abb. 4 erkennt man, daß in erster Linie die hochangeregten Niveaus $\text{Ar}^+ (ns)$ ($n > 7$) und $\text{Ar}^+ (md)$ ($m > 5$) durch den Zweielektronenaustausch bevölkert werden können. Mit maximalem Wirkungsquerschnitt können offensichtlich $\text{Ar}^+ (6d)$ und $\text{Ar}^+ (8s)$ besetzt werden, da die Energiedefekte dieser Reaktionen bei 0.001 eV bzw. 0.009 eV liegen.

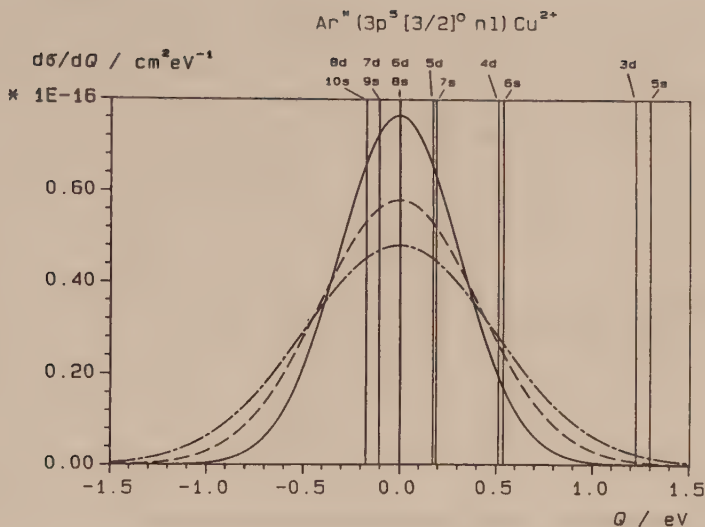
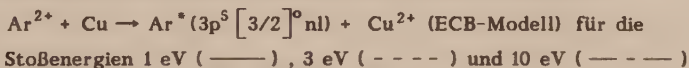


Abb. 4: Reaktionsfenster eines Zweielektronen-Transferprozesses



Der zeitliche Ablauf eines solchen Zweielektronenaustauschs läßt sich wie folgt darstellen:

Das ungestörte Ar^{2+} -Projektilion nähert sich von großen Kernabständen dem Cu-Atom, das sich aus Cu^+ -Ionenrumpf und Elektron zusammensetzt. Beim Kernabstand $R = 13.49 a_0$ (s. Abb. 5a) überwindet das erste Elektron (Symbol ●) die Potentialbarriere und verbleibt nun im quasimolekularen Zustand bei -11.76 eV . Nachdem sich das Ar^{2+} -Ion und das Cu^+ -Ion bis auf einen Kernabstand von $8.05 a_0$ genähert haben, kann das zweite Elektron (Symbol ○) die Potentialbarriere überwinden und wird im quasimolekularen Zustand bei -27.05 eV gebunden (s. Abb. 5b). Auch bei weiterer Verringerung des Kernabstandes verbleiben beide Elektronen in diesen Zuständen (Abb. 5c).

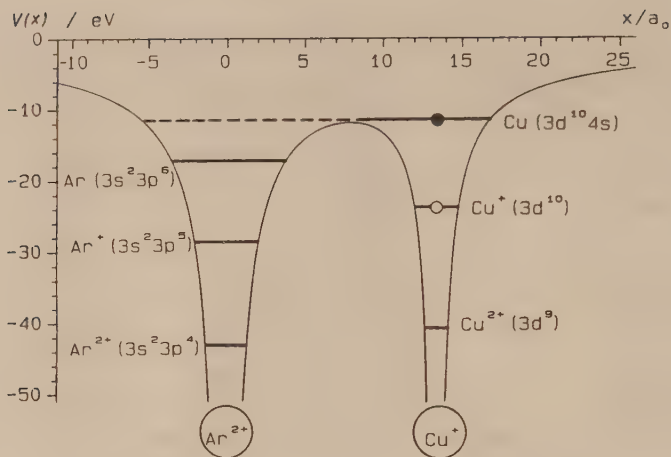
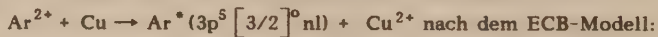


Abb. 5a: Schematischer Ablauf eines Zweielektronentransfers



Annäherung beider Stoßpartner auf den Kernabstand $13.5 a_0$

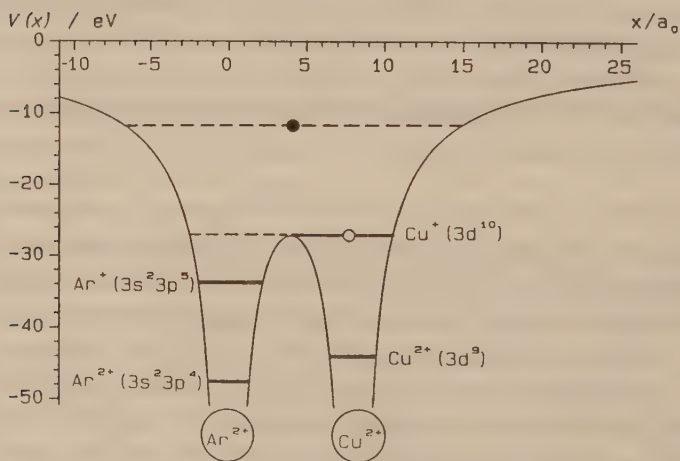


Abb. 5b: Annäherung beider Stoßpartner auf den Kernabstand $8 a_0$

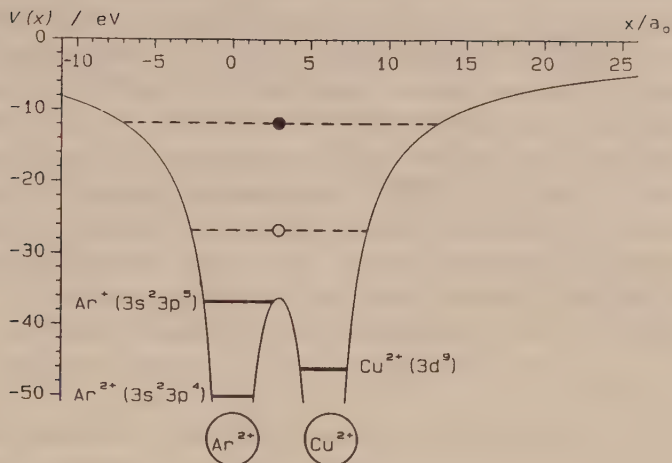


Abb. 5c: Schematischer Ablauf eines Zweielektronentransfers

$\text{Ar}^{2+} + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^*(3p^5 [3/2]^0 \text{nl}) + \text{Cu}^{2+}$ nach dem ECB-Modell:

Annäherung beider Stoßpartner auf den Kernabstand $6 a_0$

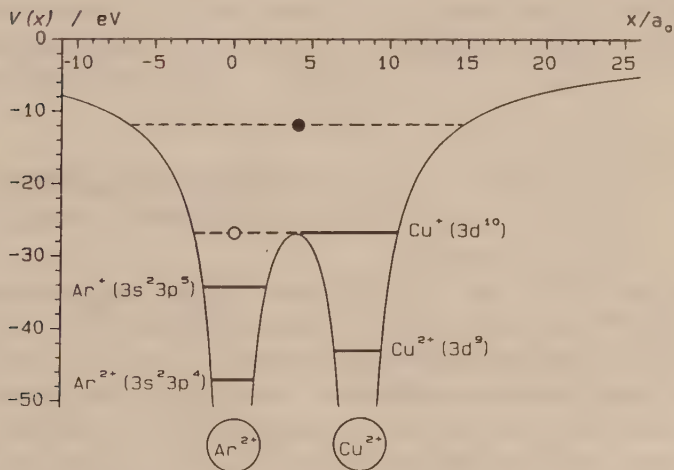


Abb. 5d: Auseinanderlaufen der Stoßpartner auf den Kernabstand $8 a_0$

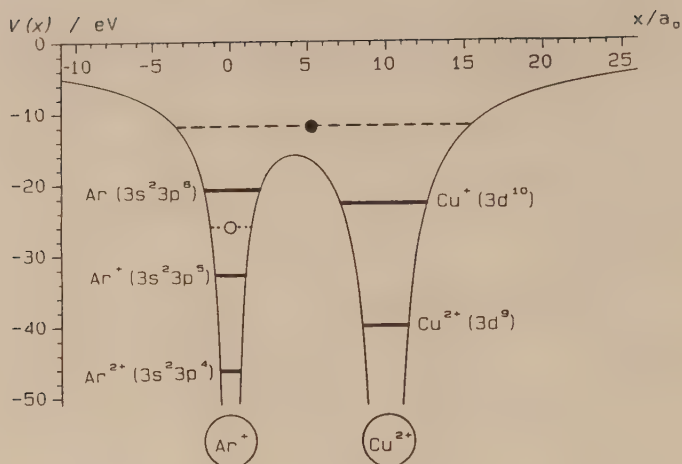


Abb. 5e: Schematischer Ablauf eines Zweielektronentransfers

$\text{Ar}^{2+} + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^* (3p^5 [3/2]^o nl) + \text{Cu}^{2+}$ nach dem ECB-Modell:
Auseinanderlaufen der Stoßpartner auf den Kernabstand $10 a_0$

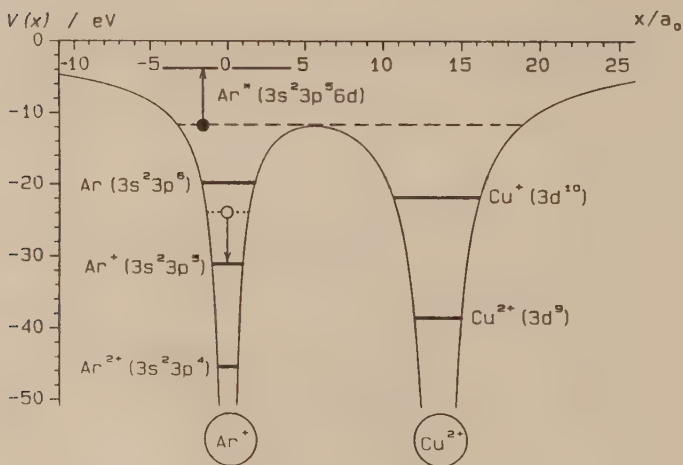


Abb. 5f: Auseinanderlaufen der Stoßpartner auf den Kernabstand $13.5 a_0$

Beim anschließenden Auseinanderlaufen der Stoßpartner passiert nun folgendes: Beim Kernabstand $8.05 a_0$ kann das zweite Elektron in einen virtuellen Zustand eingefangen werden, der 7.39 eV über dem nächsttieferen Niveau, dem Ar^+ -Grundzustand, liegt (Abb. 5d). Das Elektron verbleibt in diesem virtuellen Zustand (Abb. 5e), bis beim Kernabstand $13.49 a_0$ das quasimolekulare erste Elektron energetisch die Potentialbarriere erreicht (Abb. 5f). Das zweite Elektron wird nun unter Abgabe von $\Delta E = 7.39 \text{ eV}$ in den Ar^+ -Grundzustand eingefangen, das erste Elektron wird gleichzeitig um diese Energiedifferenz angeregt und hat nun eine potentielle Energie von -4.42 eV . Der durch das Cu^{2+} -Ion abgesenkte $\text{Ar}^+(6d)$ -Zustand liegt genau bei dieser Energie, ein Einfang des Elektrons beim weiteren Auseinanderlaufen beider Ionen in diesen ArI -Zustand scheint also sehr wahrscheinlich.

Der hier geschilderte Ablauf eines korrelierten Zweielektronentransfers ist nur dann möglich, wenn die Lebensdauer des virtuellen Zustandes etwas größer als diejenige Zeit dt ist, die beim Auseinanderlaufen beider Stoßpartner zwischen $R = 8.05 a_0$ und $R = 13.49 a_0$ vergeht. Bei angenommenen Stoßenergien von 1 eV bis 10 eV liegt dt zwischen $1.31 \cdot 10^{-13} \text{ s}$ und $4.15 \cdot 10^{-14} \text{ s}$, die Lebensdauern von virtuellen Zuständen können durchaus in derselben Größenordnung liegen.

Korrelierte Zweielektronen-Transferprozesse wurden bisher auch in anderen Stoßsystemen festgestellt, so z. B. bei Stößen niederenergetischer O^{6+} -Ionen mit He-Atomen (Stolterfoht 1986).

2.1.5 Quantenmechanische Beschreibung von Zuständen zweiatomiger Moleküle

Die Rechnungen mit dem erweiterten klassischen Modell zeigen, daß die Besetzung hochangeregter ArI -Niveaus durch einen direkten Zweielektronentransfer $\text{Ar}^{2+} + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^*(nl) + \text{Cu}^{2+}$ sehr wahrscheinlich ist. In diesem Kapitel soll mit Hilfe von Potentialkurvenrechnungen und -abschätzungen diskutiert werden, ob dieser Transfer eher als einstufiger korrelierter Prozeß oder als Folge zweier sukzessiver Einelektronen-Transferprozesse abläuft. Dazu muß eine quantenmechanische Darstellung der zweiatomigen Quasimoleküle $(\text{Ar}^{2+} \text{Cu})$, $(\text{Ar}^+ \text{Cu}^{(*)})$ und $(\text{Ar}^* \text{Cu}^{2+})$ gefunden werden.

Als quantenmechanischer Ansatz wird im allgemeinen die Born-Oppenheimer-Näherung verwendet. Sie berücksichtigt bei der quantenmechanischen Darstellung von Zuständen zweiatomiger Moleküle den großen Massenunterschied - und damit Geschwindigkeitsunterschied - zwischen den schweren Kernen und den leichten Elektronen. Mit der Annahme der Unabhängigkeit von Kern- und Elektronenbewegung lautet der Ansatz für den totalen Hamilton-Operator des Systems dann

$$H = T_R + H_{el} \quad (29)$$

Der Operator T_R ist dabei der Operator der kinetischen Energie der Kerne. In den Operator H_{el} gehen in erster Linie die kinetische Energie der Elektronen und die einzelnen Coulomb-Potentiale ein. Für den Fall $z_A > z_B$ bzw. $z_B = 0$ (also auch bei Betrachtung eines Zweielektronentransfers) darf außerdem die Polarisationswechselwirkung

$$V_{pol} = - \frac{\alpha z_A^2 e^2}{R^4 8 \pi \epsilon_0} \quad (30)$$

zwischen Ion A^{z_A+} und neutralem Atom B nicht vernachlässigt werden. Die Operatoren haben damit folgende Form:

$$T_R = - \frac{\hbar^2}{2\mu} \vec{\nabla}_R^2 \quad \text{mit} \quad \mu = \frac{m_A m_B}{(m_A + m_B)} ; \quad (31)$$

$$H_{el} = \sum_{i=1}^N \left(- \frac{\hbar^2}{2m_e} \vec{\nabla}_i^2 - \frac{z_A e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_{iA}} - \frac{z_B e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_{iB}} + \sum_{j=1+1}^N \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_{ij}} + \frac{z_A z_B}{4 \pi \epsilon_0 R} - \frac{\alpha z_A^2 e^2}{R^4 8 \pi \epsilon_0} \right) . \quad (32)$$

Dabei ist N die Gesamtzahl der Elektronen, m_e die Elektronenmasse, r_{iA} und r_{iB} die Abstände des i-ten Elektrons vom Kern A bzw. B. r_{ij} ist der Abstand des i-ten Elektrons vom j-ten Elektron, z_A und z_B sind die Ladungen vom Kern A bzw. B und α ist die Polarisierbarkeit.

Die Gesamtwellenfunktion des Molekülsystems läßt sich infolge der Unabhängigkeit von Kern- und Elektronenbewegung mit folgendem Separationsansatz darstellen:

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_k \chi_k(\vec{R}) \psi_k(\vec{r}, \vec{R}) . \quad (33)$$

Die Wellenfunktion $\chi_k(\vec{R})$ beschreibt die Kernbewegung, $\{\psi_k(\vec{r}, \vec{R})\}$ sei eine vollständige, orthogonale Basis von Funktionen. $\vec{R}$ seien die Kernkoordinaten, $\vec{r}$ die Elektronenkoordinaten. Damit ergibt sich aus der stationären Schrödinger-Gleichung

$$H\Psi = E_g\Psi \quad (E_g = \text{Gesamtenergie des Systems}) \quad (34)$$

das Gleichungssystem

$$(T_R + H_{11} + K_{11} - E_g) \chi_1 = - \sum_{k \neq 1} (H_{k1} + K_{k1}) \chi_k \quad (35)$$

mit

$$H_{k1} = \langle \psi_1 | H_{el} | \psi_k \rangle \quad (36)$$

und

$$K_{k1} = \langle \psi_1 | T_R | \psi_k \rangle - \frac{\hbar^2}{\mu} \langle \psi_1 | \vec{\nabla}_R | \psi_k \rangle * \vec{\nabla}_R . \quad (37)$$

Wählt man in der sog. "adiabatischen Darstellung" als Wellenfunktionen Ψ die Eigenfunktionen ψ_k des Hamilton-Operators H_{el} , so ergibt sich die Gleichung

$$(T_R + U_1 + K_{11}^{\text{adiabat.}} - E_g) \chi_1^{\text{adiabat.}} = - \sum_{k \neq 1} K_{k1}^{\text{adiabat.}} \chi_k^{\text{adiabat.}} . \quad (38)$$

Die U_1 sind dabei die Eigenwerte des Hamilton-Operators H_{el} , die Nicht-Diagonalelemente $K_{k1}^{\text{adiabat.}}$ beschreiben die kinematische Kopplung der Kern- und Elektronenbewegung. Bei langsamen Stößen sind diese Kopplungsterme verschwindend gering, so daß in diesem Fall ein entkoppeltes Gleichungssystem für Kernzustände im Potential $U_1(\vec{R})$ vorliegt. Der Stoßprozeß wird als adiabatisch bezeichnet, da Übergänge in benachbarte Zustände unwahrscheinlich sind.

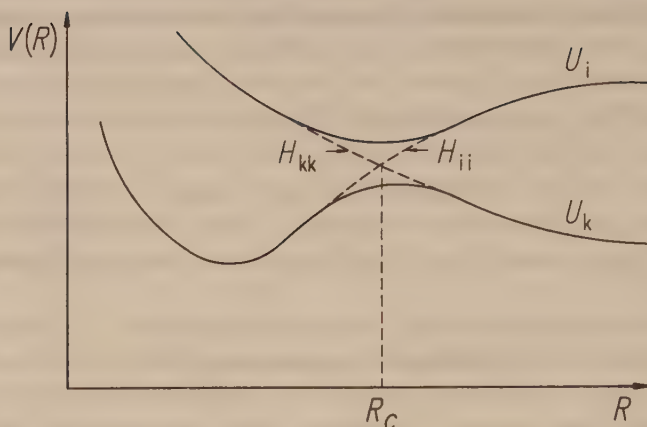


Abb. 6: Adiabatische (—) und diabatische (- - -) Potentialkurven in einem Zweizustandssystem

Das adiabatische Modell (s. Abb. 6) wird jedoch bei Betrachtung höherer Stoßgeschwindigkeiten unbrauchbar: Die Nicht-Diagonalelemente des Kopplungsterms werden besonders bei solchen Kernabständen R_c , wo der Abstand zweier adiabatischer Potentialkurven $U_i(\vec{R})$ und $U_k(\vec{R})$ sein Minimum erreicht ("Pseudokreuzung"), so groß, daß sie nicht mehr vernachlässigt werden können. In der sog. "diabatischen Darstellung" sind die Basisfunktionen keine exakten Eigenfunktionen des Hamilton-Operators H_{el} , so daß Nicht-Diagonalelemente H_{kl} existieren, die Übergänge in benachbarte Zustände ermöglichen.

Die Schrödinger-Gleichung lautet in diesem Fall:

$$(T_R + H_{11} - E_g) \chi_1^{\text{diabat.}} = - \sum_{k \neq 1} H_{kl} \chi_k^{\text{diabat.}} \quad (39)$$

Wegen dieser Konfigurationswechselwirkung kann in der diabatischen Darstellung ein Kreuzungspunkt R_c existieren, an dem $H_{11}(R_c) = H_{kk}(R_c)$ gilt.

Bei ebendiesem Kernabstand liegt in der adiabatischen Darstellung eine Pseudokreuzung der Potentialkurve $U_1(R_c)$ mit der Potentialkurve $U_k(R_c)$ vor. Die minimale Differenz zwischen diesen beiden adiabatischen Potentialkurven beträgt dort $2 * H_{1k}$.

Zur Bestimmung des Wirkungsquerschnitts für einen bestimmten Elektronentransfer wird in vielen Fällen das sog. Landau-Zener-Modell verwendet (Landau 1932, Zener 1932, Stückelberg 1932). Nach diesem Modell finden Übergänge zwischen zwei Zuständen ausschließlich bei solchen Kernabständen statt, bei denen sich die beiden zugehörigen diabatischen Potentialkurven kreuzen. In diesem Übergangsbereich wird Linearität der diabatischen Potentialkurven und Konstanz des Kopplungsterms H_{1k} angenommen. Die Wahrscheinlichkeit p , daß im Kernabstandsbereich um R_c ein Übergang zwischen zwei adiabatischen Potentialkurven bei Stoßgeschwindigkeiten $v_r = (2E/m)^{1/2}$ erfolgt, ergibt sich als

$$p = \exp \left(- \frac{v^*}{v_r} \right) \quad (40)$$

mit

$$v^* = \frac{2\pi H_{12}^2}{\hbar \left. \frac{d|H_{11} - H_{22}|}{dR} \right|_{R=R_c}} \quad (41)$$

Der totale Transfer-Wirkungsquerschnitt läßt sich daraus als Integral wie folgt berechnen:

$$\sigma = 2\pi \int_0^{\rho_{\max}} \rho p(\rho) (1 - p(\rho)) d\rho = 4\pi R_c^2 \left(1 - \frac{H_{11}(R_c)}{E} \right) G(\lambda) \quad (42)$$

mit

$$\lambda = \frac{v^*}{v_r} \left(1 - \frac{H_{11}(R_c)}{E} \right)^{-1/2} \quad (43)$$

und

$$G(\lambda) = \int_1^\infty x^{-3} e^{-\lambda x} (1 - e^{-\lambda x}) dx \quad (44)$$

Daraus ergibt sich ein maximaler Wirkungsquerschnitt

$$\sigma_{\max} \approx 0.452 \pi R_c^2 \quad (45)$$

bei der maximalen relativen Stoßgeschwindigkeit

$$v_{\max} \approx \frac{v^*}{0.424} * \left(1 - \frac{H_{11}(R_c)}{E}\right)^{1/2} \quad (46)$$

Bei Kenntnis des exakten Verlaufs der verschiedenen diabatischen Potentialkurven H_{11} und der radialen Geschwindigkeit v_r der Stoßpartner an den Kreuzungspunkten R_c zweier Potentialkurven läßt sich demnach die Übergangswahrscheinlichkeit und damit auch der Wirkungsquerschnitt des Ladungsaustausches berechnen. Die Wechselwirkungs-Matrixelemente H_{ik} lassen sich direkt durch den Abstand zweier adiabatischer Potentialkurven bestimmen. Wenn diese Potentialkurven nicht bekannt sind, werden gewöhnlich semiempirische Näherungen von H_{1k} verwendet, die für viele Stoßsysteme gelten (s. z. B. Koslowski 1988, b).

Für den Fall des Einelektronentransfers kann eine Näherung von Olson und Salop (1976) benutzt werden:

$$H'_{12} = 9.13 z_A^{-1/2} \exp(-1.324 \beta_1 R' z_A^{-1/2}) \quad (47)$$

Die dabei verwendeten reduzierten atomaren Variablen sind wie folgt definiert:

$$\beta_1 = \left(2 * (I_B' - EB_m')\right)^{1/2} = \left((I_B - EB_m) / hc R_H\right)^{1/2} \quad (48)$$

$$H'_{12} = H_{12} / 2 hc R_H \quad (49)$$

$$R' = R / a_0 \quad (50)$$

Dabei sind I_B die Ionisierungsenergie von B^{Z_B+} , EB_m die Energie eines atomaren Zustandes des Ions $B^{(Z_B+1)+}$, R_H die Rydberg-Konstante und a_0 der 1. Bohrsche Radius. Näherung (47) gilt für $4 < z_A < 54$ und $v_r < 10^8$ cm/s.

Eine Näherung für wasserstoff- und alkaliähnliche Systeme von Olson, Smith und Bauer (1971) lautet:

$$H'_{12} = 1.044 \frac{\alpha_1 \beta_1}{4} (\alpha_1 + \beta_1) R' \exp \left(-\frac{1}{2} (\alpha_1 + \beta_1) R' 0.857 \right), \quad (51)$$

$$\alpha_1 = \left(2 (I_A - EA_n) \right)^{1/2} = \left((I_A - EA_n) / hc R_H \right)^{1/2}. \quad (52)$$

Die Rekombinationsenergie von $A^{z_A^+}$ nach $A^{(z_A-1)^+}$ wird mit I_A , die Energie eines atomaren Zustandes des $A^{(z_A-1)^+}$ -Ions mit EA_n bezeichnet. Die Genauigkeit dieser Näherung im Vergleich zu exakten störungstheoretischen Rechnungen liegt für wasserstoff- und alkaliähnliche Systeme bei mittleren Kernabständen ($> 35 a_0$) bei 10 %. Für Kernabstände um $10 a_0$ ist der Näherungswert jedoch etwa zweimal so groß wie der theoretisch ermittelte (Janev 1976).

Für den Einelektronentransfer $Ar^{2+} + Cu \rightarrow Ar^+ + Cu^{++} (3d^9 7s)$ lassen sich mit diesen beiden Näherungen Landau-Zener-Übergangswahrscheinlichkeiten $p(R)$ gemäß Gleichung (40) und (41) berechnen; die Ergebnisse sind in Abb. 7 für eine Stoßenergie von 3 eV dargestellt.

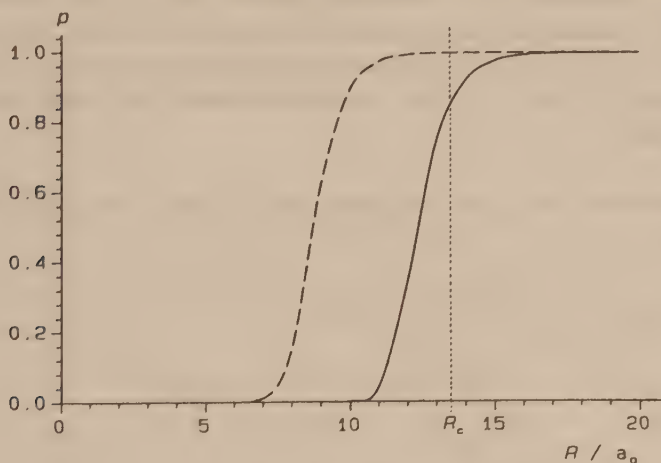


Abb. 7: Landau-Zener-Übergangswahrscheinlichkeit $p(R)$ des Einelektronentransfers $Ar^{2+} + Cu \rightarrow Ar^+ + Cu^{++} (3d^9 7s)$ (H_{12} -Näherung: Olson/Salop (—), Olson/Smith/Bauer (---))
 R_c = klassischer Kreuzungsradius gemäß Gleichung (6))

Für einen direkten Zweielektronentransfer existieren bisher keine semiempirischen Näherungen, da nicht genügend Daten von solchen Prozessen vorhanden sind. Es gibt jedoch neuere quantenmechanische Berechnungen, die nicht nur für symmetrische Stoßsysteme - also exakt resonante Transferprozesse (Komarov, Janev 1966; Chibisov 1976) - sondern auch für asymmetrische Stoßsysteme gültig sind (Grozdanov, Janev 1980; Chibisov, Janev 1988). Die Zweielektronen-Austausch-Wechselwirkung ist danach wie folgt definiert:

$$\Delta(R) = 2 * (\langle \psi_A | H_{e1} | \psi_B \rangle - S \langle \psi_A | H_{e1} | \psi_A \rangle), \quad (53)$$

$$S = \langle \psi_A | \psi_B \rangle. \quad (54)$$

H_{e1} ist dabei der Teil des Hamilton-Operators, der die kinetischen und potentiellen Energien der aktiven Elektronen beinhaltet (s. Gleichung (32)). Die diabatischen Molekülwellenfunktionen ψ_A und ψ_B beschreiben für große Kernabstände die Situation, in der beide aktiven Elektronen am A^{z_A+} - bzw. am $B^{(z_B+2)+}$ -Ionenrumpf gebunden sind. Im ersten Fall werden zwei Elektronen mit gleichem Drehimpuls l , unterschiedlichen Drehimpulsprojektionen m_1 und m_2 , Gesamtdrehimpuls $\vec{L}$, Gesamtdrehimpulsprojektion M_L , Gesamtspin $\vec{S}$, und Gesamtspinprojektion M_S betrachtet. Im zweiten Fall sind die entsprechenden Größen l' , m_1' und m_2' , $\vec{L}'$, $M_{L'}$, $\vec{S}'$ und $M_{S'}$. Die Ortskoordinaten der beiden Elektronen seien $\vec{r}_1$ und $\vec{r}_2$.

Die Entwicklung der beiden Wellenfunktionen ψ_A und ψ_B hat damit folgende Form:

$$\begin{aligned} \psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{m_1, m_2} \begin{bmatrix} l & l & L \\ m_2 & m_1 & M_L \end{bmatrix} \left(\tilde{\varphi}_{1A}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right. \\ \left. + (-1)^S * \tilde{\varphi}_{2A}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right) \chi_{S, M_S}(1, 2), \end{aligned} \quad (55)$$

$$\begin{aligned} \psi_B = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{m_1', m_2'} \begin{bmatrix} l' & l' & L' \\ m_2' & m_1' & M_{L'} \end{bmatrix} \left(\tilde{\varphi}_{1B}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right. \\ \left. + (-1)^{S'} * \tilde{\varphi}_{2B}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right) \chi_{S', M_{S'}}(1, 2). \end{aligned} \quad (56)$$

Dabei sind die $\begin{bmatrix} I & I & L \\ m_2 & m_1 & M_L \end{bmatrix}$ Clebsch-Gordan-Koeffizienten der Entwicklung, die χ_{S, M_S} und χ_{S, M_S} Zweielektronen-Spin-Wellenfunktionen und $\tilde{\varphi}_{1A}$ bzw. $\tilde{\varphi}_{1B}$ ortsabhängige Zweielektronen-Wellenfunktionen.

Letztgenannte Wellenfunktionen lassen sich durch folgende Separationsansätze darstellen:

$$\tilde{\varphi}_{1A}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_{1A}(\vec{r}_1) * \varphi_{2A}(\vec{r}_2), \quad (57)$$

$$\tilde{\varphi}_{2A}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_{1A}(\vec{r}_2) * \varphi_{2A}(\vec{r}_1). \quad (58)$$

Danach befindet sich im ersten Fall das 1. Elektron im Zustand φ_{1A} , also auf einem äußeren Orbital des A^{zA+} -Ions, und das 2. Elektron im Zustand φ_{2A} , was einem inneren Orbital desselben Ions entspricht. Im zweiten Fall befindet sich das zweite Elektron im Zustand φ_{1A} und das erste im Zustand φ_{2A} . Für $\tilde{\varphi}_{1B}$ und $\tilde{\varphi}_{2B}$ gelten analoge Separationsansätze. Unter Beachtung von Orthogonalitätsbedingungen erhält man nun die Zweielektronen-Austauschwechselwirkung $\Delta(R)$

$$\Delta(R) = \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_1', m_2'}} \begin{bmatrix} I & I & L \\ m_2 & m_1 & M_L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I' & I' & L' \\ m_2' & m_1' & M_L' \end{bmatrix} \left((-1)^S \Delta_1 + \Delta_2 \right), \quad (59)$$

wobei

$$\begin{aligned} \Delta_1 = & \left\langle \varphi_{1A}(\vec{r}_1) * \varphi_{2A}(\vec{r}_2) \left| H_{e1} \right| \varphi_{1B}(\vec{r}_2) * \varphi_{2B}(\vec{r}_1) \right\rangle \\ & + \left\langle \varphi_{1A}(\vec{r}_2) * \varphi_{2A}(\vec{r}_1) \left| H_{e1} \right| \varphi_{1B}(\vec{r}_1) * \varphi_{2B}(\vec{r}_2) \right\rangle \end{aligned} \quad (60)$$

und

$$\begin{aligned} \Delta_2 = & \left\langle \varphi_{1A}(\vec{r}_1) * \varphi_{2A}(\vec{r}_2) \left| H_{e1} \right| \varphi_{1B}(\vec{r}_1) * \varphi_{2B}(\vec{r}_2) \right\rangle \\ & + \left\langle \varphi_{1A}(\vec{r}_2) * \varphi_{2A}(\vec{r}_1) \left| H_{e1} \right| \varphi_{1B}(\vec{r}_2) * \varphi_{2B}(\vec{r}_1) \right\rangle. \end{aligned} \quad (61)$$

Δ_1 beschreibt dabei einen "kreuzenden" Zweielektronenübergang, Δ_2 einen "parallelen" Übergang.

Zur Berechnung von Δ_1 und Δ_2 werden für die Wellenfunktionen φ_{1A} und φ_{1B} der äußeren Orbitale wasserstoffähnliche Näherungen verwendet. Die Wellenfunktionen φ_{2A} und φ_{2B} der inneren Orbitale werden als wasserstoffähnliche Grundzustands-Wellenfunktionen angesetzt. Dabei werden statt absoluter Elektronenkoordinaten $\vec{r}_1, \vec{r}_2$ relative Koordinaten verwendet: r_{1A} ist der Abstand des 1. Elektrons zum A^{zA+} -Ion, r_{2B} der Abstand des 2. Elektrons zum $B^{(zB+2)+}$ -Ions.

Mit diesen wasserstoffähnlichen Ansätzen gilt beispielsweise für Gleichung (57):

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_{1A}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \varphi_{1A}(\vec{r}_1) * \varphi_{2A}(\vec{r}_2) \\ &\sim r_{1A}^{(z_A-1)/\alpha_1-1} * \exp(-\alpha_1 r'_{1A}) * \exp(-\alpha_2 r'_{2A}) . \end{aligned} \quad (62)$$

Dabei werden erneut reduzierte atomare Variablen $r'_{1A} = r_{1A} / a_0$, $r'_{2A} = r_{2A} / a_0$ usw. benutzt. Δ_1 wird maximal bei $r_{1A} = r_{2B} = R$ oder $r_{2A} = r_{1B} = R$, der dominante Term ist also

$$\Delta_1(R') \sim \exp\left(-(\alpha_1 + \beta_1) R'\right) . \quad (63)$$

Der kreuzende Übergang ist also offensichtlich nur von der Bindungsenergie derjenigen Elektronen abhängig, die auf dem äußeren Orbital von A^{zA+} und $B^{(zB+2)+}$ maximale Aufenthaltswahrscheinlichkeit besitzen. Der Zweielektronentransfer läßt sich auch hier nur als korrelierter Prozeß verstehen: Das äußere aktive Elektron wird von $B^{(zB+2)+}$ eingefangen und in einem energetisch tieferliegenden ionischen Zustand gebunden, während das innere aktive Elektron gleichzeitig in ein energetisch höherliegendes ionisches Niveau gehoben wird.

Im Gegensatz zu Δ_1 hat Δ_2 ein Maximum für $r_{1A} = r_{2A} = r_{1B} = r_{2B} = R/2$ und ist somit von allen Ionisationsenergien abhängig :

$$\Delta_2(R') \sim \exp\left(-(\alpha_1 + \alpha_2 + \beta_1 + \beta_2) * \frac{R'}{2}\right) . \quad (64)$$

Vergleicht man am Beispiel symmetrischer Stoßsysteme beide Summanden der Zweielektronen-Austauschwechselwirkung, zeigt sich, daß kreuzende Übergänge dominant sind: es gilt $\Delta_1 \gg \Delta_2$ (Chibisov, Janev 1988).

Für den asymmetrischen Fall lautet die exakte Form der Zweielektronen-Austauschwechselwirkung:

$$\Delta_1(R') = D * R'^{(z_A + (z_B + 2) - 1) * (\frac{1}{\alpha_1} + \frac{1}{\beta_1})} * \exp(-(\alpha_1 + \beta_1)R'). \quad (65)$$

In den Vorfaktor D gehen im wesentlichen Normierungsfaktoren der Wellenfunktionen und Clebsch-Gordan-Koeffizienten der Wellenfunktion-Entwicklung ein. D ist abhängig von $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2, z_A, z_B, l, m_1, m_2, L, M_L, S, M_S, m'_1, m'_2, L', M'_L, S'$ und M'_S . Für die Spezialfälle $l = l' = 0$ und $l = l' = 1$ ist dieser Vorfaktor explizit bestimmt (Chibisov, Janev 1988). Für das Stoßsystem $\text{Ar}^{2+} + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^*(nl) + \text{Cu}^{2+}$ lautet die Formel für die Zweielektronen-Austauschwechselwirkung schließlich

$$\Delta_1(R') = 5 * R'^{1.77} * \exp(-1.83R') * 2hcR_H \equiv 2H_{12} \quad (66)$$

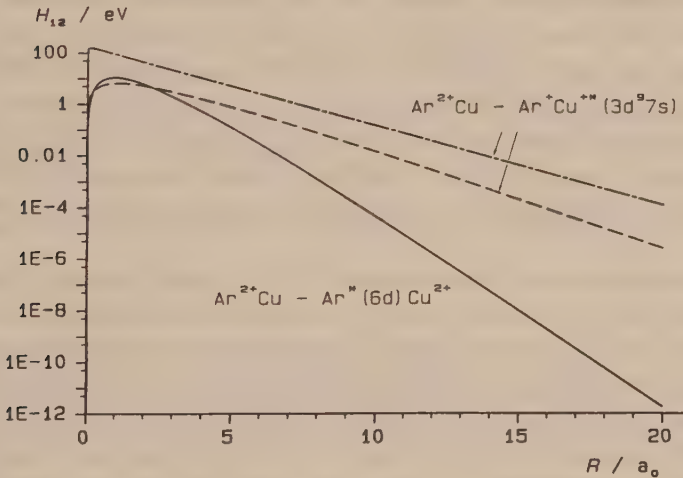


Abb. 8: Übergangsmatrixelemente $H_{12}(R)$ für einen
 Einelektronentransfer $\text{Ar}^{2+} + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^+ + \text{Cu}^{**}(3d^9 7s)$
 nach Gleichung (47) Olson/Salop 1976) (— — —)
 und Gleichung (51) (Olson/Smith/Bauer 1971) (- - - -)
 und für einen Zweielektronentransfer $\text{Ar}^{2+} + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^*(6d) + \text{Cu}^{2+}$
 nach Gleichung (66) (Chibisov/Janev 1988) (—)

In Abbildung 8 sind für Kernabstände zwischen 0 und $20 a_0$ zum Vergleich die Übergangsmatrixelemente für einen Zweielektronen-Transferprozeß $\text{Ar}^{2+} + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^*(6d) + \text{Cu}^{2+}$ und für einen Einelektronen-Transferprozeß $\text{Ar}^{2+} + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^+ + \text{Cu}^{**}(3d^9 7s)$ aufgetragen. Sie unterscheiden sich bei $10 a_0$ schon um 2 bis 3 Größenordnungen, bei $20 a_0$ sogar schon um 6 bis 8 Größenordnungen. Die Landau-Zener-Wahrscheinlichkeit für einen Zweielektronentransfer ist also nur für kleine Kernabstände ($\leq 10 a_0$) vergleichbar mit der eines Einelektronentransfers.

Falls nun sämtliche Potentialkurven der Quasimoleküle $(\text{Ar}^{2+}\text{Cu})$, $(\text{Ar}^+\text{Cu}^{**})$ und $(\text{Ar}^+\text{Cu}^{2+})$ bekannt wären, könnte man Landau-Zener-Wahrscheinlichkeiten für alle möglichen Potentialkurvenkreuzungen berechnen, um festzustellen, ob der Zweielektronentransfer direkt oder sukzessiv über zwei Einelektronen-Transferprozesse abläuft.

Die Potentialkurven können mit Hilfe von sog. "frozen core"-Rechnungen bestimmt werden (Jungen 1981; Kaufmann et al. 1983). Dabei werden für die verschiedenen angeregten Zustände des äußeren Elektrons ("Leuchtelektrons") im Feld eines "eingefrorenen" ionischen Rumpfes die exakten Wellenfunktionen in Abhängigkeit vom Kernabstand R errechnet. Für das System $(\text{Ar}^{2+}\text{Cu})$, das sich aus ionischem Rumpf $(\text{Ar}^{2+}\text{Cu}^+)$ und Leuchtelektron zusammensetzt, wurde von Staemmler die Potentialkurve auf diese Weise berechnet (Staemmler 1985).

Für die Potentialkurven des Quasimoleküls $(\text{Ar}^+\text{Cu}^{2+})$ ist die Berechnung jedoch weit schwieriger, da das Leuchtelektron im Feld des Ionenrumpfes $(\text{Ar}^+\text{Cu}^{2+})$ sowohl $(\text{Ar}^+\text{Cu}^{2+})$ - als auch $(\text{Ar}^+\text{Cu}^{**})$ -Zustände besetzen kann. Die Berücksichtigung der Wechselwirkung dieser beiden Rydberg-Serien ist für eine exakte Berechnung der Potentialkurven unerläßlich. Bei der Betrachtung hochangeregter Leuchtelektronen wird jedoch die Basis der für die "frozen core"-Rechnung notwendigen Wellenfunktionen extrem groß. Bei Berechnungen von Zuständen, die 1.12 eV unterhalb des $(\text{Ar}^*(6d)\text{Cu}^{2+})$ -Energieniveaus liegen, besteht die Basis bereits aus 91 Wellenfunktionen, wobei die Aufspaltung durch Multipllett- und Feinstruktur noch gar nicht berücksichtigt wurde (Staemmler 1988). Es existieren zwar für höherenergetische $(\text{Ar}^+\text{Cu}^{**})$ -Zustände keine exakten Daten, die Energieniveaus dieser Rydberg-Zustände sind jedoch näherungsweise bestimmbar.

Die zugehörigen $(\text{Ar}^+ \text{Cu}^{2+})$ -Potentialkurven liegen in diesem Energiebereich jedoch so eng beieinander, daß eine genaue Unterscheidung der Kreuzungspunkte dieser Potentialkurven mit den Potentialkurven der Quasimoleküle $(\text{Ar}^{2+} \text{Cu})$ und $(\text{Ar}^+ \text{Cu}^{2+})$ nicht mehr möglich ist.

Man kann jedoch allgemeine qualitative Aussagen über verschiedene $(\text{Ar}^+ \text{Cu}^{2+})$ - und $(\text{Ar}^+ \text{Cu}^{2+})$ -Potentialkurven machen. Bei der Abschätzung der $(\text{Ar}^+ \text{Cu}^{2+})$ -Potentialkurven gilt, daß die Polarisationswechselwirkung zwischen Cu^{2+} -Ion und hochangeregtem Argon-Atom für Kernabstände, die größer als der Radius der klassischen Elektronenbahn r_{Rydberg} des Argon-Leuchtelektrons sind, sicherlich dominant ist. Bei kleinen Kernabständen unterliegt das Leuchtelektron vorwiegend dem Einfluß des Coulomb-Potentials des Cu^{2+} -Ions. Damit gilt:

$$V(R) \approx -\frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 R} + Q \quad \text{für } R < r_{\text{Rydberg}}(nl), \quad (67)$$

$$V(R) \approx -\frac{\alpha}{R^4} \frac{4e^2}{8\pi\epsilon_0} + Q \quad \text{für } R > r_{\text{Rydberg}}(nl). \quad (68)$$

Q ist der Energiedefekt der Umladungsreaktion, α die Polarisierbarkeit eines hochangeregten $\text{Ar}^{2+}(nl)$ -Zustandes.

Diese Polarisierbarkeit ist nach Nicholis/ Stewart (1962) definiert als

$$\alpha(n) = 4 \cdot \sum_{n' > n} \frac{f_{n'n}}{E_{n'n}^2} a_0^3, \quad (69)$$

wobei $f_{n'n}$ die Oszillatorenstärke des Übergangs vom Zustand $E_{n'}$ nach E_n und $E_{n'n}$ die Energiedifferenz zwischen diesen beiden Energieniveaus ist. Für Rydberg-Zustände gilt für die Polarisierbarkeit folgende Skalierung (Stebbing, Dunning 1983):

$$\alpha(n) \sim n^7. \quad (70)$$

Für die ArI-Zustände (3d) bis (5d) $[3/2]^0$ sowie (4s) bis (7s) $[3/2]^0$ sind die Oszillatorenstärken für Übergänge in höhere Zustände gerechnet worden (Katsonis, Drawin 1980); eine Berechnung der Polarisierbarkeit dieser Zustände ist also nach Gleichung (69) möglich. Die Polarisierbarkeit der Zustände, die höher als (5d) bzw. (7s) $[3/2]^0$ liegen, läßt sich durch Gleichung (70) abschätzen.

In Tabelle 3 sind die errechneten bzw. abgeschätzten Werte für die Polarisierbarkeit α sowie die klassischen Durchmesser r_{Rydberg} der äußeren Elektronenbahnen und die effektive Quantenzahl n^* der Rydberg-ähnlichen Zustände aufgeführt.

ArI-Zustand	r_{Rydberg} / a_0	n^*	α / cm^3
$3p^5 5d$	23.872	4.886	$2.480 \cdot 10^{-20}$
$3p^5 6d$	35.069	5.922	$8.885 \cdot 10^{-20}$
$3p^5 7s$	23.706	4.869	$1.116 \cdot 10^{-19}$
$3p^5 8s$	34.623	5.884	$2.842 \cdot 10^{-19}$

Tabelle 3 : Atomare Daten hochangeregter, Rydberg-ähnlicher ArI-Zustände

(r_{Rydberg} = klassischer Durchmesser der äußeren Elektronenbahn,
 n^* = effektive Quantenzahl, α = Polarisierbarkeit)

Durch die starke Polarisierbarkeit der hochangeregten ArI-Zustände ist eine Anpassung der Näherung für kleine Kernabstände (s. Gleichung (67)) an die Näherung für große Kernabstände (s. Gleichung (68)) sehr problematisch. Zudem zeigen Rechnungen tieferliegender ($\text{Ar}^* \text{Cu}^{2+}$)-Potentialkurven (Staemmler 1988), daß das Coulomb-Potential von Cu^{2+} je nach Gestalt der Ar^* -Wellenfunktion auch noch für $R > r_{\text{Rydberg}}$ dominieren kann. So besitzt beispielsweise die $\text{Cu}^{2+} \text{Ar}^* 4p[3/2]^0$ -Potentialkurve bei $25 a_0$ ein Minimum, während der klassische Elektronenbahnradius bei $5 a_0$ liegt. Da jedoch für die ArI-Zustände 5d, 7s, 6d und 8s $[3/2]^0$ die genaue Form der Wellenfunktion nicht vorliegt, ist der Übergangsbereich, in dem sowohl Polarisations- als auch Coulomb-Kraft wirken, für diese Fälle nicht genau abgrenzbar.

Für kleine Kernabstände unterhalb $10 a_0$ jedoch ist die Polarisationswechselwirkung sicherlich vernachlässigbar, so daß dort die Näherung (67) gilt. Somit existieren bei $4 a_0$ Kreuzungspunkte der exakt berechneten "einlaufenden" ($\text{Ar}^{2+} \text{Cu}$)-Potentialkurve mit den genäherten "auslaufenden" ($\text{Ar}^* \text{Cu}^{2+}$)-Potentialkurven (s. Abb. 9).

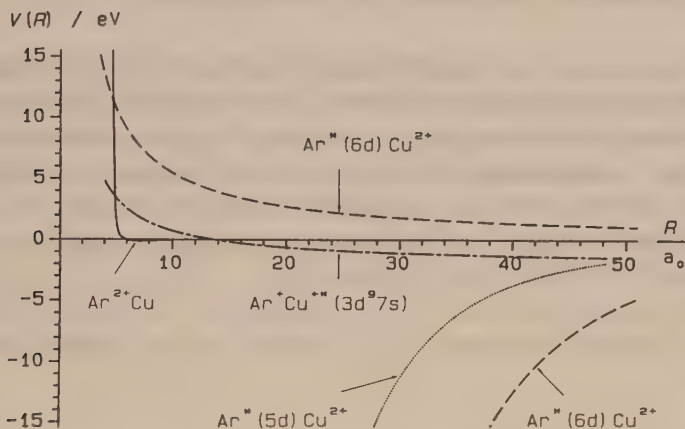


Abb. 9 : Potentialkurven für die Systeme ($\text{Ar}^{2+} \text{Cu}$) und ($\text{Ar}^* \text{Cu}^{2+}$):

- ($\text{Ar}^{2+} \text{Cu}$) "frozen core"-Rechnungen (Staemmler 1985)
- - - - ($\text{Ar}^*(6d) \text{Cu}^{2+}$)-Näherung (67) für $R < 35 a_0$ und
Näherung (68) für $R > 35 a_0$
- ($\text{Ar}^*(5d) \text{Cu}^{2+}$)-Näherung (68) für $R > 24 a_0$
- . - . ($\text{Ar}^* \text{Cu}^{2+}(3d^9 7s)$)-Näherungen (71) und (72)

Man kann nun die Landau-Zener-Wahrscheinlichkeit p für diesen Zweielektronen-transfer gemäß Gleichung (40) und (41) berechnen, wobei das Matrixelement der Zweielektronen-Austauschwechselwirkung H_{12} mit Gleichung (66) genähert wird. Für angenommene Stoßenergien zwischen 1 und 10 eV ergeben sich theoretische Landau-Zener-Wahrscheinlichkeiten zwischen 0.27 und 0.66, ein Übergang scheint also nur für hohe Stoßenergien wahrscheinlich.

Allerdings muß berücksichtigt werden, daß H_{12} mit einer Unsicherheit von etwa einem Faktor 2 behaftet ist, was sich entsprechend deutlich auch als Fehler bei der Berechnung der Landau-Zener-Wahrscheinlichkeit p bemerkbar macht. Eine konkrete Aussage über die Übergangswahrscheinlichkeit am Kreuzungspunkt beider Potentialkurven ist also nur bei genauerer Kenntnis von H_{12} wirklich möglich. Der maximale Wirkungsquerschnitt für den Zweielektronentransfer am Kreuzungspunkt bei $4 a_0$ liegt nach dieser Betrachtung bei $6 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$.

Betrachten wir nun einen Zweielektronentransfer, der sich aus zwei aufeinanderfolgenden Einelektronen-Transferprozessen zusammensetzt. Die Rechnungen mit dem erweiterten klassischen Modell (s. Abschnitt 2.1.4) hatten ergeben, daß nur diejenigen Transferprozesse $\text{Ar}^{2+} + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^+ + \text{Cu}^{+*}$ mit großer Wahrscheinlichkeit auftreten, bei denen der Energiedefekt Q bei 2.02 eV liegt. Dies ist der Fall bei dem Zustand $(\text{Ar}^+ \text{Cu}^{+*} (3d^8 4s 4p))$ mit $Q = 2.02 \text{ eV}$ und bei dem Zustand $(\text{Ar}^+ \text{Cu}^{+*} (3d^9 7s))$ mit $Q = 1.95 \text{ eV}$.

Für die Potentialkurven dieser $\text{Ar}^+ \text{Cu}^{+*}$ -Zustände läßt sich folgende Näherung finden:

$$V(R) \approx + \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 R} + Q \quad \text{für } R < r_{\text{Rydberg}}(\text{nl}), \quad (71)$$

$$V(R) \approx + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} + Q \quad \text{für } R > r_{\text{Rydberg}}(\text{nl}). \quad (72)$$

wobei der Radius der klassischen Elektronenbahn r_{Rydberg} für den $(\text{Ar}^+ \text{Cu}^{+*} (3d^8 4s 4p))$ -Zustand $5.65 a_0$ und für den $(\text{Ar}^+ \text{Cu}^{+*} (3d^9 7s))$ -Zustand $5.83 a_0$ beträgt.

Die Kreuzungspunkte der entsprechenden Potentialkurven mit den $(\text{Ar}^+ \text{Cu}^{2+})$ -Potentialkurven liegen bei $R > 50 a_0$, wenn für diese Kernabstände die Polarisationswechselwirkung zwischen Cu^{2+} -Ionen und Ar^+ -Atomen als dominierende Wechselwirkung gemäß Gleichung (68) angenommen wird (s. Abb. 9).

Bei diesen großen Kernabständen jedoch werden die entsprechenden Matrixelemente H_{12} sehr klein, so daß an diesen Kreuzungspunkten das System nach dem Landau-Zener-Modell jeweils auf der diabatischen ($\text{Ar}^+ \text{Cu}^{++}$)-Potentialkurve verbleibt und ein Transferprozeß äußerst unwahrscheinlich wird. Der vorliegende Zweielektronentransfer läßt sich im Potentialkurvenbild also nicht als zweistufiger Prozeß erklären.

Abschließend läßt sich also sagen, daß die Besetzung der betrachteten hochangeregten ArI-Zustände durch einen Zweielektronentransfer vom neutralen Kupfer nicht Folge zweier sukzessiver Eielektronen-Transferprozesse sein kann, da die Wahrscheinlichkeiten für Elektronenaustauschprozesse der Form $\text{Ar}^+ + \text{Cu}^{++} \rightarrow \text{Ar}^* (\text{nl}) + \text{Cu}^{2+}$ verschwindend gering sind. Ein direkter Zweielektronentransfer dagegen scheint gerade für die betrachteten hochangeregten ArI-Zustände - und speziell für den Zustand $6d \left[\frac{3}{2} \right]^0$ - sehr wahrscheinlich zu sein, wie sich aus den Rechnungen mit dem erweiterten klassischen Modell ergibt.

2.2 BESTIMMUNG DES ZWEELEKTRONENTRANSFER-RATENKOEFFIZIENTEN UNTER VERWENDUNG EINES MODIFIZIERTEN KORONAMODELLS

2.2.1 Aufstellung von Bilanzgleichungen für angeregte atomare Zustände

Zur Bestimmung der Ratenkoeffizienten von Zweielektronen-Transferprozessen, die in Kapitel 2.1 diskutiert wurden, müssen die Besetzungsdichten n^j verschiedener atomarer Niveaus j ermittelt werden. Dazu ist es notwendig, mit Hilfe eines geeigneten Plasmamodells Bilanzgleichungen für diese atomaren Niveaus aufzustellen. Im folgenden werden die wichtigsten Mechanismen diskutiert, die für Bevölkerung bzw. Entvölkerung der Zustände j sorgen.

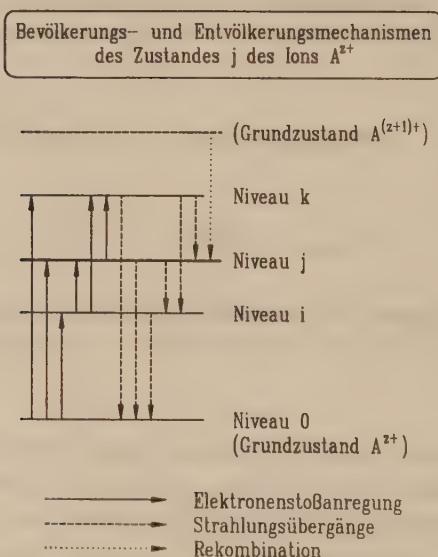


Abb. 10: Bevölkerungs- und Entvölkerungsmechanismen des Zustandes j des Ions A^{z+}

2.2.1.1 Elektronenstöße

Zu den wichtigsten Anregungsmechanismen gehören Stöße der Atome und Ionen im Grundzustand mit Elektronen der Energie E . Elektronenstöße mit bereits angeregten Atomen im Zustand $k > j$ und $i < j$ sind nur dann von Bedeutung, wenn die Lebensdauer $\tau = 1/A_{j0}$ des entsprechenden atomaren Zustandes j mindestens so groß ist wie die mittlere Zeit zwischen zwei Stößen. Es müßten also für einen Zustand j die folgenden Ungleichungen gelten:

$$A_{j0} \leq n_e * \sum_{k>j} \langle \sigma_{jk} v_e \rangle = n_e * \sum_{k>j} \int_0^{\infty} \sigma_{jk}(E) v_e F(E) dE, \quad (73)$$

$$A_{j0} \leq n_e * \sum_{i<j} \langle \sigma_{ij} v_e \rangle. \quad (74)$$

n_e ist die Elektronendichte, v_e die Elektronengeschwindigkeit und $F(E)$ die Elektronenenergie-Verteilungsfunktion. Die Wahrscheinlichkeit für den atomaren Übergang vom Zustand j in den Grundzustand ist A_{j0} , der Wirkungsquerschnitt für die Anregung eines Atoms im Zustand j in den Zustand k ist $\sigma_{jk}(E)$. Gelten diese Beziehungen in den Fällen, die untersucht werden, nicht, kann sowohl die Elektronenstoßanregung als auch -ionisation bereits angeregter Zustände vernachlässigt werden.

Zur Bevölkung des Zustandes j können auch Kaskaden aus höherliegenden Zuständen $k > j$ beitragen, die wiederum durch Elektronenstoß aus dem Grundzustand bevölkert werden. Bei Aufstellung jeder einzelnen Bilanzgleichung für einen bestimmten atomaren Zustand muß geklärt werden, welchen Einfluß die einzelnen oben beschriebenen Stoßprozesse haben. Die dazu nötige Berechnung der verschiedenen Elektronenstoß-Ratenkoeffizienten $\langle \sigma_{jk}(E) v_e \rangle$ wird in Kapitel 2.3.2 vorgenommen.

2.2.1.2 Photonenstöße, Photoionisierung

Da die bisher gemessenen typischen Elektronendichten des EZR-Plasmas zwischen 10^{16} m^{-3} und 10^{17} m^{-3} liegen (Schneider, Wiesemann 1985; Marlinghaus 1985), kann man von einem optisch dünnen Plasma sprechen.

Emittierte Photonen werden demnach also vom Plasma nicht mehr absorbiert, so daß Photonenstoß-Anregung von Atomen oder Ionen und natürlich auch Photoionisierung im vorliegenden EZR-Plasma keine Rolle spielen.

2.2.1.3 Rekombination

Der Umkehrprozeß der Elektronenstoßionisation ist die Dreierstoßrekombination $e + e + A^{(z+1)+} \rightarrow A^{z+} + e$. Die Rate für diesen Prozeß ist jedoch proportional zu n_e^2 , so daß im vorliegenden Fall des optisch dünnen Plasmas dieser Prozeß nicht mehr weiter betrachtet werden muß. Als weiterer Rekombinationsprozeß ist die Stoß-Strahlungsrekombination $e + A^{(z+1)+} \rightarrow A^{z+} + h\nu$ aufzuführen, deren Rate proportional zur Elektronendichte ist. Die Abhängigkeit des Rekombinationskoeffizienten α vom Ladungszustand z und der Elektronentemperatur T_e ergibt sich aus folgender zugeschnittenen Gleichung (McWhirter 1965):

$$\alpha(T_e, z+1) = 2.79 \cdot 10^{-17} \cdot \frac{z^2}{\sqrt{T_e / K}} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}. \quad (75)$$

Damit liegt der Rekombinationskoeffizient für den Fall $e + A^{(z+1)+} \rightarrow A^{z+} + h\nu$ für Elektronentemperaturen zwischen 1 eV und 10 eV zwischen $2.59 \cdot 10^{-19} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ und $8.19 \cdot 10^{-20} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$. Für Rekombination höher geladener Ionen ist α etwas größer: Für den Prozeß $e + A^{7+} \rightarrow A^{6+} + h\nu$ z. B. liegt der Koeffizient zwischen $9.32 \cdot 10^{-18} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ und $2.95 \cdot 10^{-18} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$. Nur für den Fall, daß die Rekombinationskoeffizienten in der gleichen Größenordnung wie die Ratenkoeffizienten anderer Prozesse liegen, muß dieser Prozeß bei Aufstellung der Bilanzgleichungen mit berücksichtigt werden.

2.2.1.4 Strahlungsübergänge

Zur Entvölkerung eines atomaren Niveaus j tragen in erster Linie Dipolübergänge in tieferliegende Zustände i bei, wobei ein Photon der Energie $h\nu_{ij}$ emittiert wird. Die entsprechenden Übergangswahrscheinlichkeiten A_{ji} sind jedoch gerade für viele Übergänge im neutralen Kupfer und neutralen Argon oft nicht in den verfügbaren Datensammlungen vorhanden (Wiese, Smith, Miles 1969; Wiese, Martin 1980; Katsonis, Drawin 1980). Aus diesem Grund werden in Kapitel 2.3.1 neuere Daten und eigene Abschätzungen derjenigen Übergangswahrscheinlichkeiten diskutiert, die in die Bilanzgleichungen eingehen.

2.2.1.5 Umladungsstöße

Symmetrische Umladungsstöße $A + A^{z+} \rightarrow A^{z+} + A$ sind wegen ihres hohen Wirkungsquerschnitts in Plasmen zwar sehr wahrscheinlich, jedoch gehen sie wegen der Ununterscheidbarkeit der Stoßpartner nicht in die Bilanzgleichungen ein. Unsymmetrische Umladungsstöße der Plasmaionen und -atome A^{z+} mit Verunreinigungsionen und -atomen B dagegen spielen besonders im vorliegenden EZR-Plasma offensichtlich eine große Rolle (Marlinghaus, Huber, Wiesemann 1983).

Unter Beachtung aller oben aufgeführten Prozesse, die zur Bevölkerung bzw. Entvölkerung eines atomaren Niveaus j beitragen, lautet die allgemeine Bilanzgleichung unter Voraussetzung stationärer Verhältnisse schließlich:

$$\begin{aligned}
 n_e n_{A^{z+}}^0 & \left\langle \left[\sigma_{0j} + \sum_{k>j} \sigma_{0k} \frac{A_{kj}}{\sum_{l<k} A_{kl}} \right] v_e \right\rangle \longleftarrow \text{(Elektronenstoß-} \\
 & \hspace{15em} \text{anregung)} \\
 + \sum_{l<j} n_e n_{A^{z+}}^l & \langle \sigma_{lj} v_e \rangle \longleftarrow \text{(Elektronenstoß-} \\
 & \hspace{15em} \text{anregung)} \\
 - n_{A^{z+}}^j & (A_{j0} + \sum_{l<j} A_{lj}) \longleftarrow \text{(Strahlungs-} \\
 & \hspace{15em} \text{übergänge)} \\
 + n_e n_{A^{(z+1)+}}^0 & \alpha(kT_e, z+1) \longleftarrow \text{(Rekombination)} \\
 + n_B^0 n_{A^{(z+2)+}}^0 & \langle \sigma_{\text{trans}} (v_{A^{(z+2)+}} - v_B) \rangle \longleftarrow \text{(Zweielektronen-} \\
 & \hspace{15em} \text{transfer)} \\
 = \frac{\partial n_{A^{z+}}^j}{\partial t} & = 0.
 \end{aligned}
 \tag{76}$$

Die physikalischen Größen, die in Gleichung (76) eingehen, sind:

n_e	=	Elektronendichte
v_e	=	Elektronengeschwindigkeit
$n_{A^{z+}}^0$	=	Besetzungsdichte des Grundzustandes von A^{z+}
$n_{A^z}^j$	=	Besetzungsdichte des angeregten Zustandes j von A^{z+}
n_B^0	=	Besetzungsdichte des Grundzustandes des Verunreinigungsatoms B
A_{kj}	=	Wahrscheinlichkeit für optischen Übergang vom Zustand k in den tieferliegenden Zustand j im A^{z+} - System
σ_{oj}	=	Wirkungsquerschnitt für Anregung des Zustandes j von A^{z+} aus dem Grundzustand durch Elektronenstoß
σ_{trans}	=	Wirkungsquerschnitt für einen Zweielektronentransfer von $A^{(z+2)+}$ nach B
$v_{A^{(z+2)+}}$	=	Geschwindigkeit des Ions $A^{(z+2)+}$
v_B	=	Geschwindigkeit des Verunreinigungsatoms B
$\alpha(T_e, z+1)$	=	Rekombinationskoeffizient

2.2.2 Übergangswahrscheinlichkeiten im neutralen Argon und Kupfer

Die quantitative Kenntnis der Übergangswahrscheinlichkeiten A_{ji} ist zur Bestimmung von Elektronenstoßratenkoeffizienten und Strahlungsübergängen und damit zur Bestimmung der absoluten Besetzungsdichten atomarer Zustände unerlässlich. Leider enthalten die verfügbaren Datensammlungen (Wiese, Smith, Miles 1969; Wiese, Martin 1980; Katsonis, Drawin 1980) nur wenige atomare Daten für diejenigen Resonanzübergänge im neutralen Kupfer und im neutralen Argon, die bei den Bilanzrechnungen dieser Untersuchung eine Rolle spielen. Aus diesem Grund werden für beide Systeme neuere Messungen, Berechnungen und Abschätzungen der Resonanzübergangs-Wahrscheinlichkeiten vorgestellt.

2.2.2.1 Übergangswahrscheinlichkeiten im neutralen Kupfer

Die Konfiguration des neutralen Kupfers ist bis auf zehn zusätzliche Elektronen, die im Grundzustand die 3d-Schale besetzen, identisch mit der von neutralem Kalium. Neutrales Kupfer hat die gleiche Grundzustandskonfiguration $4s^2 S_{1/2}$ und die gleichen $nl^2 L$ -Rydberg-Serien wie das Alkali. Durch die Kopplung dieser ungestörten $3d^{10} nl$ -Rydberg-Konfigurationen mit $3d^9 4s 4p$ -Konfigurationen sind jedoch bei den Berechnungen von Resonanz-Übergangswahrscheinlichkeiten Alkali-Näherungen nicht zulässig. Es existieren jedoch neuere Multi-Konfigurations-Hartree-Fock-Rechnungen für Übergänge $4s^2 S \rightarrow nl^2 S$, die die oben aufgeführten Kopplungen mitberücksichtigen (Carlsson 1988). Die so errechneten Daten sowie experimentell ermittelte Übergangswahrscheinlichkeiten sind in Tabelle 4 aufgelistet.

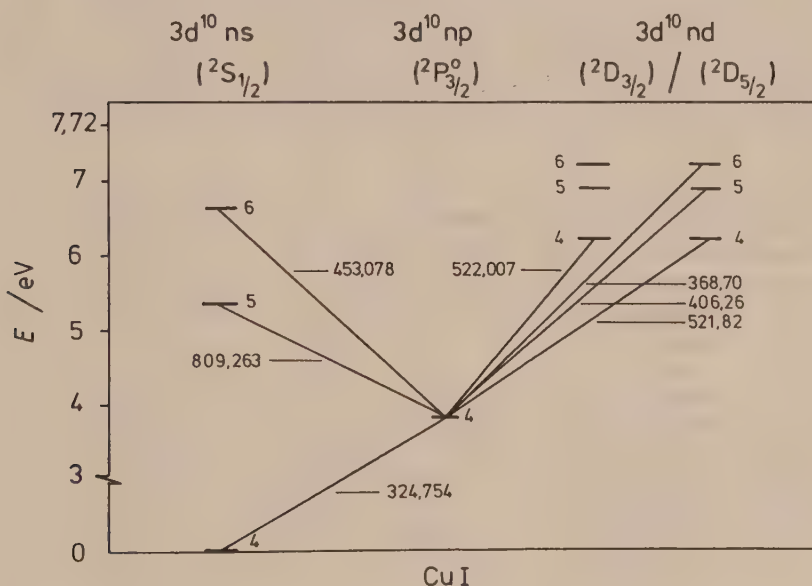


Abb. 11 : Vereinfachtes Termschema des neutralen Kupfers
(Angabe der Wellenlängen in nm)

Oberer Zustand	E_j (cm^{-1})	g_j	Unterer Zustand	E_i (cm^{-1})	g_i	A_{ji} (s^{-1})	Quelle	λ (nm)
$4p^2P_{3/2}^o$	30784	4	$4s^2S_{1/2}$	0	2	$1.39 \cdot 10^8$	b, e	324.754
$4p^2P_{3/2}^o$	30784	4	$4s^2S_{1/2}$	0	2	$1.43 \cdot 10^8$	c, f, g	324.754
$4p^2P_{3/2}^o$	30784	4	$4s^2S_{1/2}$	0	2	$1.37 \cdot 10^8$	d	324.754
$4p^2P_{3/2}^o$	30784	4	$4s^2D_{5/2}$	11203	6	$2.00 \cdot 10^6$	e	510.554
$4p^2P_{3/2}^o$	30784	4	$4s^2D_{5/2}$	11203	6	$1.43 \cdot 10^8$	b	510.554
$4p^2P_{3/2}^o$	30784	4	$4s^2D_{3/2}$	13245	4	$2.40 \cdot 10^5$	e	570.024
$4p^2P_{3/2}^o$	30784	4	$4s^2D_{3/2}$	13245	4	$1.37 \cdot 10^8$	b	570.024
$6d^2D_{5/2}$	57895	6	$4p^2P_{3/2}^o$	30784	4	$1.39 \cdot 10^7$	b	368.7
$6d^2D_{5/2}$	57895	6	$4s^2S_{1/2}$	0	2	$2.02 \cdot 10^7$	h	172.73
$6d^2D_{5/2}$	57895	6	$4s^2S_{1/2}$	0	2	$1.79 \cdot 10^7$	j, k	172.73
$5d^2D_{5/2}$	55391	6	$4p^2P_{3/2}^o$	30784	4	$2.10 \cdot 10^7$	e	406.26
$5d^2D_{5/2}$	55391	6	$4p^2P_{3/2}^o$	30784	4	$2.12 \cdot 10^7$	b	406.26
$5d^2D_{5/2}$	55391	6	$4p^2P_{3/2}^o$	30784	4	$2.88 \cdot 10^7$	c	406.26
$5d^2D_{5/2}$	55391	6	$4s^2S_{1/2}$	0	2	$3.94 \cdot 10^7$	h	180.53
$5d^2D_{5/2}$	55391	6	$4s^2S_{1/2}$	0	2	$3.36 \cdot 10^7$	j	180.53
$5d^2D_{5/2}$	55391	6	$4s^2S_{1/2}$	0	2	$3.85 \cdot 10^7$	k	180.53
$6s^2S_{1/2}$	52849	2	$4p^2P_{3/2}^o$	30784	4	$8.40 \cdot 10^6$	e	453.078
$6s^2S_{1/2}$	52849	2	$4p^2P_{3/2}^o$	30784	4	$1.16 \cdot 10^7$	b	453.078
$6s^2S_{1/2}$	52849	2	$4p^2P_{3/2}^o$	30784	4	$8.83 \cdot 10^6$	c	453.078
$6s^2S_{1/2}$	52849	2	$4s^2S_{1/2}$	0	2	$2.18 \cdot 10^7$	h	189.22
$6s^2S_{1/2}$	52849	2	$4s^2S_{1/2}$	0	2	$1.89 \cdot 10^7$	i	189.22
$6s^2S_{1/2}$	52849	2	$4s^2S_{1/2}$	0	2	$2.04 \cdot 10^7$	j	189.22
$4d^2D_{5/2}$	49942	6	$4p^2P_{3/2}^o$	30784	4	$7.5 \cdot 10^7$	e	521.820
$4d^2D_{5/2}$	49942	6	$4p^2P_{3/2}^o$	30784	4	$2.22 \cdot 10^7$	b	521.820
$4d^2D_{5/2}$	49942	6	$4p^2P_{3/2}^o$	30784	4	$8.14 \cdot 10^7$	c	521.820
$4d^2D_{5/2}$	49942	6	$4p^2P_{3/2}^o$	30784	4	$8.21 \cdot 10^7$	d	521.820
$4d^2D_{5/2}$	49942	6	$4s^2S_{1/2}$	0	2	$1.02 \cdot 10^8$	h	200.23
$4d^2D_{5/2}$	49942	6	$4s^2S_{1/2}$	0	2	$7.04 \cdot 10^7$	j	200.23
$4d^2D_{5/2}$	49942	6	$4s^2S_{1/2}$	0	2	$8.26 \cdot 10^7$	k	200.23
$4d^2D_{3/2}$	49935	4	$4p^2P_{3/2}^o$	30784	4	$1.37 \cdot 10^7$	d	522.007
$4d^2D_{3/2}$	49935	4	$4s^2S_{1/2}$	0	2	$1.03 \cdot 10^8$	h	200.26
$4d^2D_{3/2}$	49935	4	$4s^2S_{1/2}$	0	2	$6.89 \cdot 10^7$	j	200.26
$4d^2D_{3/2}$	49935	4	$4s^2S_{1/2}$	0	2	$8.77 \cdot 10^7$	k	200.26
$5s^2S_{1/2}$	43137	2	$4p^2P_{3/2}^o$	30784	4	$4.76 \cdot 10^7$	b	809.263
$5s^2S_{1/2}$	43137	2	$4p^2P_{3/2}^o$	30784	4	$3.11 \cdot 10^7$	c	809.263
$5s^2S_{1/2}$	43137	2	$4s^2S_{1/2}$	0	2	$5.92 \cdot 10^7$	h	231.82

Tabelle 4: Übergangswahrscheinlichkeiten A_{ji} für atomare Übergänge
im neutralen Kupfer (Quellen s. Seite 43)

2.2.2.2 Übergangswahrscheinlichkeiten im neutralen Argon

Das Edelgas Argon besitzt im Grundzustand die stabile Elektronenkonfiguration $3p^6 \ ^1S$. Es gibt nur sehr wenige experimentell ermittelte oder theoretisch bestimmte Oszillatorenstärken für Übergänge aus diesem Grundzustand $3p^6$ in höher liegende Niveaus $3p^5 nl$ (Wiese, Smith, Miles 1969; Wiese, Martin 1980). Ein Grund mag darin zu finden sein, daß bei der Rechnung dieser Resonanzübergangswahrscheinlichkeiten die Berücksichtigung der Korrelation aller sechs $3p$ -Elektronen Schwierigkeiten bereitet.

Ein anderer Grund liegt in der Besonderheit der Kopplung: Im angeregten Zustand $3p^5 nl$ koppelt der Drehimpuls $\vec{I}_c$ des atomaren Rumpfes (cores) mit dem Spin $\vec{s}_c$ des Rumpfes zum Vektor $\vec{j}_c = \vec{I}_c + \vec{s}_c$. Der sog. intermediäre Vektor $\vec{K}$ setzt sich aus $\vec{j}_c$ und dem Drehimpuls $\vec{I}_e$ des angeregten Elektrons zusammen: $\vec{K} = \vec{j}_c + \vec{I}_e$. Dieser Vektor koppelt wiederum mit dem Spin $\vec{s}_e$ des angeregten Elektrons zum Vektor $\vec{J} = \vec{K} + \vec{s}_e$. Es liegt beim ArI-Atommodell damit als Spezialfall einer intermediären Kopplung die sog. (j,K)-Kopplung vor.

Ein atomarer Zustand, der durch diese Kopplung beschrieben werden kann, hat die Notation $\left[\begin{smallmatrix} 2S+1 \\ L_{j_c} \end{smallmatrix} \right] (nl) \left[K \right]_J$. Im Rahmen dieser Arbeit werden hauptsächlich die Zustände $\left[\begin{smallmatrix} 2 \\ P_{3/2} \end{smallmatrix} \right] (nl) \left[3/2 \right]_1^o$ betrachtet, die auch mit der Kurznotation $(nl) \left[3/2 \right]^o$ bezeichnet werden. Abbildung 12 zeigt das ArI-Termschema mit denjenigen Zuständen, die in die weitere Betrachtung mit eingehen.

Die Resonanzübergänge erfolgen also aus angeregten Zuständen, die durch (j,K)-Kopplung beschrieben werden, in den Grundzustand, der durch eine andere Kopplung beschrieben wird. Damit liegt allein schon bei der Berechnung der Energien von $3p^5 nl$ -Zuständen der Fehler bei 7 %, so daß die Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten noch ungenauer wird (Blanke 1988).

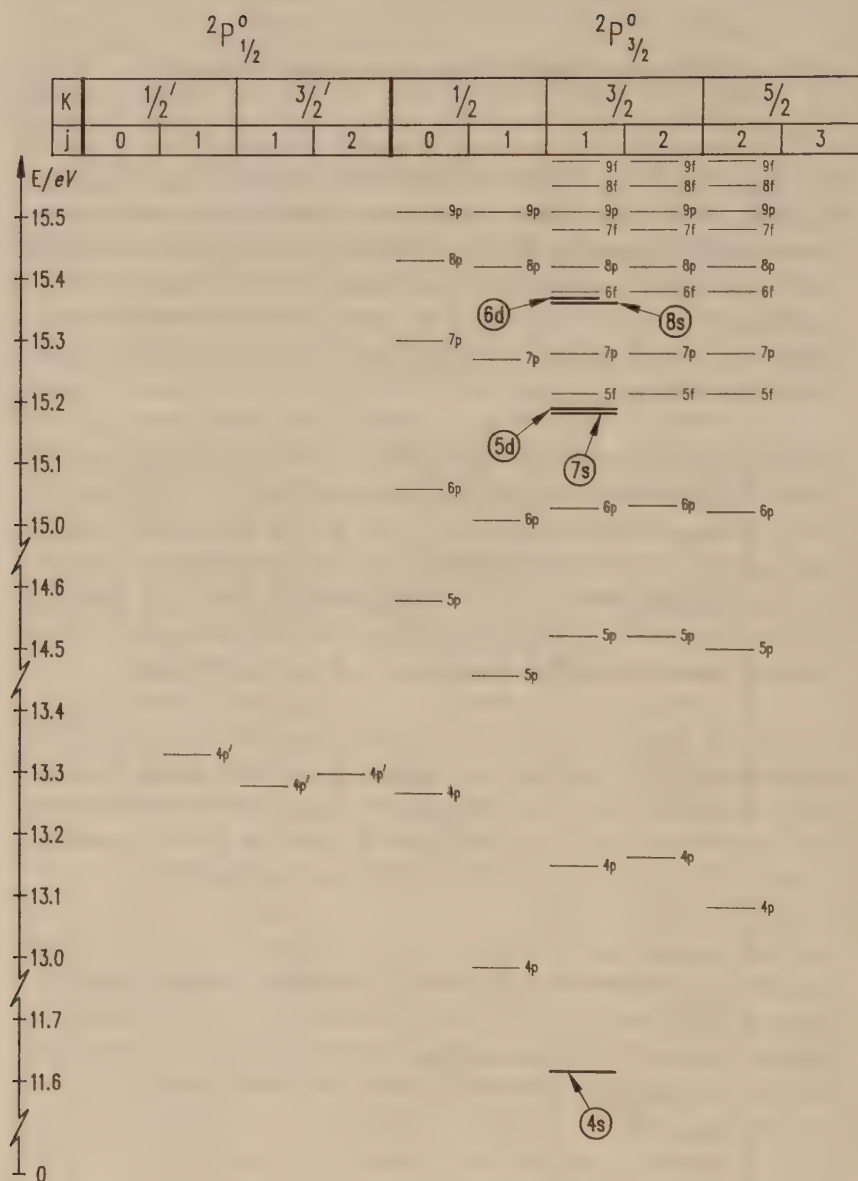


Abb. 12: Vereinfachtes Termschema des neutralen Argons

Da die hochangeregten $3p^5 [3/2]^o$ ns- und -nd-Zustände näherungsweise als Rydberg-ähnliche Zustände betrachtet werden können (s. Abschnitt 2.1.5), kann man folgende Näherung (Wiese, Weiss 1968) für die Oszillatorenstärken f_{ij} für wasserstoffähnliche Zustände benutzen:

$$n^3 * f_{ij} = \text{const.} \quad (77)$$

Dabei gilt für die Oszillatorenstärke:

$$f_{ij} = \frac{\epsilon_0 m_e c^3}{2 \pi e^2 \nu_{ij}^2} * \frac{g_j}{g_i} * A_{ji} \quad (78)$$

Ausgehend von den in der Literatur vorhandenen Übergangswahrscheinlichkeiten A_{ji} für einige ArI-Resonanzübergänge kann man nun die Oszillatorenstärken für Übergänge aus den Zuständen $3p^5 [3/2]^o$ (nl) ($n > 5$, $l = 0$ und 2) in den Grundzustand $3p^6$ berechnen. Es wird angenommen, daß der prozentuale Fehler der so errechneten Werte genauso groß ist wie bei den tabellierten Werten. Die Wahrscheinlichkeiten der wichtigsten ArI-Übergänge, die bei der Aufstellung der Bilanzgleichungen berücksichtigt werden müssen, sind in Tabelle 5 aufgeführt.

QUELLEN DER TABELLEN 4 UND 5a - 5d:

- a.) Wiese, Smith, Miles 1969
- b.) Malakhov 1978
- c.) Migdalek 1978
- d.) Migdalek, Baylis 1978
- e.) Wiese, Martin 1980
- f.) Verolainen, Plekhotkina, Privalov 1983
- g.) Bezuglov, Gorshkov, Osherovich, Phekotkina 1983
- h.) Carlsson 1988
- i.) Carlsson, Dönszelmann, Lundberg, Persson, Sturesson, Svanberg 1987
- j.) Osherovich, Plekhotkina, Obidin 1981
- k.) Cederquist, Mannervik, Kisielinski, Forsberg, Martinson, Curtis, Ramanujam 1984
- l.) Katsonis, Drawin 1980
- m.) eigene Abschätzung (nach Gleichung (77))

Oberer Zustand	E_j (cm^{-1})	g_j	Unterer Zustand	E_i (cm^{-1})	g_i	A_{ji} (s^{-1})	Quelle	λ (nm)
6d $[3/2]^o$	124000	3	4p $[1/2]$	107054	1	$4.071 \cdot 10^4$	1	591.86
6d $[3/2]^o$	124000	3	4p $[1/2]$	104102	3	$3.126 \cdot 10^4$	1	503.83
6d $[3/2]^o$	124000	3	4p $[3/2]$	106087	3	$4.308 \cdot 10^3$	1	559.82
6d $[3/2]^o$	124000	3	4p $[3/2]$	106238	5	$1.815 \cdot 10^3$	1	564.51
6d $[3/2]^o$	124000	3	4p $[5/2]$	105617	5	$7.781 \cdot 10^1$	1	545.46
6d $[3/2]^o$	124000	3	5p $[1/2]$	117563	1	$8.368 \cdot 10^2$	1	1565.68
6d $[3/2]^o$	124000	3	5p $[1/2]$	116660	3	$4.759 \cdot 10^4$	1	1371.74
6d $[3/2]^o$	124000	3	5p $[3/2]$	117151	3	$4.133 \cdot 10^4$	1	1470.80
6d $[3/2]^o$	124000	3	5p $[3/2]$	117184	5	$7.236 \cdot 10^3$	1	1477.98
6d $[3/2]^o$	124000	3	5p $[5/2]$	116999	5	$7.774 \cdot 10^3$	1	1438.64
6d $[3/2]^o$	124000	3	$3p^6 \text{ } ^1S$	0	1	$3.98 \cdot 10^7$	m	80.647
8s $[3/2]^o$	123936	3	4p $[1/2]$	104102	3	$1.017 \cdot 10^5$	1	504.18
8s $[3/2]^o$	123936	3	4p $[5/2]$	105617	5	$3.7 \cdot 10^5$	a,e	545.742
8s $[3/2]^o$	123936	3	4p $[5/2]$	105617	5	$8.159 \cdot 10^5$	1	545.88
8s $[3/2]^o$	123936	3	4p $[3/2]$	106238	5	$1.3 \cdot 10^5$	a,e	564.869
8s $[3/2]^o$	123936	3	4p $[3/2]$	106238	5	$8.265 \cdot 10^5$	1	565.04
8s $[3/2]^o$	123936	3	4p $[3/2]$	106087	3	$4.239 \cdot 10^5$	1	560.26
8s $[3/2]^o$	123936	3	4p $[1/2]$	107054	1	$1.388 \cdot 10^5$	1	592.35
8s $[3/2]^o$	123936	3	4p' $[3/2]$	107132	3	$1.6 \cdot 10^5$	a,e	594.926
8s $[3/2]^o$	123936	3	4p' $[3/2]$	107290	5	$1.5 \cdot 10^5$	a,e	600.573
8s $[3/2]^o$	123936	3	4p' $[1/2]$	107496	3	$7.8 \cdot 10^4$	a	608.125
8s $[3/2]^o$	123936	3	5p $[1/2]$	117563	1	$6.427 \cdot 10^4$	1	1569.12
8s $[3/2]^o$	123936	3	5p $[1/2]$	116660	3	$5.982 \cdot 10^4$	1	1374.38
8s $[3/2]^o$	123936	3	5p $[3/2]$	117151	3	$2.325 \cdot 10^5$	1	1473.84
8s $[3/2]^o$	123936	3	5p $[3/2]$	117184	5	$4.543 \cdot 10^4$	1	1481.04
8s $[3/2]^o$	123936	3	5p $[5/2]$	116999	5	$4.608 \cdot 10^5$	1	1441.55
8s $[3/2]^o$	123936	3	6p $[1/2]$	121470	1	$3.787 \cdot 10^4$	1	4055.15
8s $[3/2]^o$	123936	3	6p $[1/2]$	121069	3	$3.797 \cdot 10^4$	1	3487.97
8s $[3/2]^o$	123936	3	6p $[3/2]$	121257	3	$1.497 \cdot 10^5$	1	3732.74
8s $[3/2]^o$	123936	3	6p $[3/2]$	121271	5	$2.925 \cdot 10^4$	1	3752.34
8s $[3/2]^o$	123936	3	6p $[5/2]$	121192	5	$2.967 \cdot 10^5$	1	3644.31
8s $[3/2]^o$	123936	3	$3p^6 \text{ } ^1S$	0	1	$2.42 \cdot 10^7$	m	80.687

Tabelle 5a : Übergangswahrscheinlichkeiten A_{ji} für atomare Übergänge
im neutralen Argon (Quellen s. S. 43)

Oberer Zustand	E_j (cm^{-1})	g_j	Unterer Zustand	E_i (cm^{-1})	g_i	A_{ji} (s^{-1})	Quelle	λ (nm)
7p [1/2]	123385	1	5d [3/2] ^o	122514	3	$1.945 \cdot 10^5$	1	11481.06
7p [1/2]	123190	3	5d [3/2] ^o	122514	3	$2.220 \cdot 10^4$	1	14792.89
7p [3/2]	123275	3	5d [3/2] ^o	122514	3	$8.744 \cdot 10^4$	1	13140.60
7p [3/2]	123285	5	5d [3/2] ^o	122514	3	$1.070 \cdot 10^4$	1	12970.16
7p [5/2]	123255	5	5d [3/2] ^o	122514	3	$5.655 \cdot 10^3$	1	13495.28
8p [1/2]	124440	1	5d [3/2] ^o	122514	3	$7.465 \cdot 10^4$	1	5192.11
8p [1/2]	124370	3	5d [3/2] ^o	122514	3	$8.534 \cdot 10^3$	1	5387.93
8p [3/2]	124395	3	5d [3/2] ^o	122514	3	$3.201 \cdot 10^4$	1	5316.32
8p [3/2]	124400	5	5d [3/2] ^o	122514	3	$3.952 \cdot 10^3$	1	5302.23
8p [5/2]	124390	5	5d [3/2] ^o	122514	3	$2.098 \cdot 10^3$	1	5330.49
9p [1/2]	125090	1	5d [3/2] ^o	122514	3	$3.612 \cdot 10^4$	1	3881.99
9p [1/2]	125090	3	5d [3/2] ^o	122514	3	$6.020 \cdot 10^3$	1	3881.99
9p [3/2]	125090	3	5d [3/2] ^o	122514	3	$1.926 \cdot 10^4$	1	3881.99
9p [3/2]	125090	5	5d [3/2] ^o	122514	3	$2.312 \cdot 10^3$	1	3881.99
9p [5/2]	125090	5	5d [3/2] ^o	122514	3	$1.300 \cdot 10^3$	1	3881.99
5f [3/2]	122708	3	5d [3/2] ^o	122514	3	$1.389 \cdot 10^3$	1	51546.39
5f [3/2]	122708	5	5d [3/2] ^o	122514	3	$1.667 \cdot 10^2$	1	51546.39
5f [5/2]	122708	5	5d [3/2] ^o	122514	3	$4.001 \cdot 10^3$	1	51546.39
6f [3/2]	124055	3	5d [3/2] ^o	122514	3	$1.371 \cdot 10^5$	1	6489.29
6f [3/2]	124055	5	5d [3/2] ^o	122514	3	$1.646 \cdot 10^4$	1	6489.29
6f [5/2]	124055	5	5d [3/2] ^o	122514	3	$3.949 \cdot 10^5$	1	6489.29
7f [3/2]	124868	3	5d [3/2] ^o	122514	3	$9.633 \cdot 10^4$	1	4248.09
7f [3/2]	124868	5	5d [3/2] ^o	122514	3	$1.156 \cdot 10^4$	1	4248.09
7f [5/2]	124868	5	5d [3/2] ^o	122514	3	$2.774 \cdot 10^5$	1	4248.09
8f [3/2]	125395	3	5d [3/2] ^o	122514	3	$6.570 \cdot 10^4$	1	3471.02
8f [3/2]	125395	5	5d [3/2] ^o	122514	3	$7.884 \cdot 10^4$	1	3471.02
8f [5/2]	125395	5	5d [3/2] ^o	122514	3	$1.892 \cdot 10^5$	1	3471.02
9f [3/2]	125756	3	5d [3/2] ^o	122514	3	$4.623 \cdot 10^4$	1	3084.52
9f [3/2]	125756	5	5d [3/2] ^o	122514	3	$5.548 \cdot 10^3$	1	3084.52
9f [5/2]	125756	5	5d [3/2] ^o	122514	3	$1.331 \cdot 10^5$	1	3084.52

Tabelle Sb: Übergangswahrscheinlichkeiten A_{ji} für atomare Übergänge
im neutralen Argon (Quellen s. S. 43)

Oberer Zustand	E_j (cm^{-1})	g_j	Unterer Zustand	E_i (cm^{-1})	g_i	A_{ji} (s^{-1})	Quelle	λ (nm)
5d [3/2] ^o	122514	3	4p [1/2]	104102	3	$8.482 \cdot 10^4$	l	543.12
5d [3/2] ^o	122514	3	4p [5/2]	105617	5	$6.1 \cdot 10^4$	a	591.658
5d [3/2] ^o	122514	3	4p [5/2]	105617	5	$2.121 \cdot 10^3$	l	591.82
5d [3/2] ^o	122514	3	4p [3/2]	106087	3	$9.4 \cdot 10^3$	a	608.586
5d [3/2] ^o	122514	3	4p [3/2]	106087	3	$2.234 \cdot 10^2$	l	608.75
5d [3/2] ^o	122514	3	4p [3/2]	106238	5	$1.207 \cdot 10^2$	l	614.40
5d [3/2] ^o	122514	3	4p [1/2]	107054	1	$1.6 \cdot 10^5$	a, m	646.655
5d [3/2] ^o	122514	3	4p [1/2]	107054	1	$3.562 \cdot 10^4$	l	646.83
5d [3/2] ^o	122514	3	4p [1/2]	107496	3	$3.2 \cdot 10^4$	a	665.688
5d [3/2] ^o	122514	3	5p [1/2]	117563	1	$1.994 \cdot 10^4$	l	2019.79
5d [3/2] ^o	122514	3	5p [1/2]	116660	3	$1.249 \cdot 10^5$	l	1708.23
5d [3/2] ^o	122514	3	5p [3/2]	117151	3	$1.562 \cdot 10^5$	l	1864.83
5d [3/2] ^o	122514	3	5p [3/2]	117184	5	$2.863 \cdot 10^4$	l	1876.17
5d [3/2] ^o	122514	3	5p [5/2]	116999	5	$2.499 \cdot 10^4$	l	1813.24
5d [3/2] ^o	122514	3	3p ⁶ 1S	0	1	$6.72 \cdot 10^7$	m	81.623
7p [1/2]	123385	1	7s [3/2] ^o	122479	3	$4.271 \cdot 10^5$	l	11037.53
7p [1/2]	123190	3	7s [3/2] ^o	122479	3	$4.372 \cdot 10^4$	l	14064.69
7p [3/2]	123275	3	7s [3/2] ^o	122479	3	$2.808 \cdot 10^5$	l	12562.81
7p [3/2]	123285	5	7s [3/2] ^o	122479	3	$3.456 \cdot 10^4$	l	12406.94
7p [5/2]	123255	5	7s [3/2] ^o	122479	3	$2.874 \cdot 10^5$	l	12886.59
8p [1/2]	124440	1	7s [3/2] ^o	122479	3	$1.118 \cdot 10^5$	l	5099.44
8p [1/2]	124370	3	7s [3/2] ^o	122479	3	$8.387 \cdot 10^3$	l	5288.21
8p [3/2]	124395	3	7s [3/2] ^o	122479	3	$5.881 \cdot 10^4$	l	5219.21
8p [3/2]	124000	5	7s [3/2] ^o	122479	3	$7.49 \cdot 10^3$	l	5205.62
8p [5/2]	124390	5	7s [3/2] ^o	122479	3	$5.97 \cdot 10^4$	l	5232.86
9p [1/2]	125090	1	7s [3/2] ^o	122479	3	$3.541 \cdot 10^4$	l	3829.95
9p [1/2]	125090	3	7s [3/2] ^o	122479	3	$5.901 \cdot 10^3$	l	3829.95
9p [3/2]	125090	3	7s [3/2] ^o	122479	3	$2.951 \cdot 10^4$	l	3829.95
9p [3/2]	125090	5	7s [3/2] ^o	122479	3	$3.541 \cdot 10^3$	l	3829.95
9p [5/2]	125090	5	7s [3/2] ^o	122479	3	$3.187 \cdot 10^4$	l	3829.95

Tabelle 5c : Übergangswahrscheinlichkeiten A_{ji} für atomare Übergänge im neutralen Argon (Quellen s. S. 43)

Oberer Zustand	E_j (cm^{-1})	g_j	Unterer Zustand	E_i (cm^{-1})	g_i	A_{ji} (s^{-1})	Quelle	λ (nm)
7s [3/2] ^o	122479	3	4p [1/2]	104102	3	$2.0 \cdot 10^5$	a,e	543.999
7s [3/2] ^o	122479	3	4p [1/2]	104102	3	$1.877 \cdot 10^5$	1	544.16
7s [3/2] ^o	122479	3	4p [5/2]	105617	5	$1.1 \cdot 10^6$	a,e	592.881
7s [3/2] ^o	122479	3	4p [5/2]	105617	5	$1.482 \cdot 10^6$	1	593.05
7s [3/2] ^o	122479	3	4p [3/2]	106087	3	$5.4 \cdot 10^5$	a,e	609.881
7s [3/2] ^o	122479	3	4p [3/2]	106087	3	$7.659 \cdot 10^5$	1	610.05
7s [3/2] ^o	122479	3	4p [3/2]	106238	5	$5.3 \cdot 10^5$	a,e	615.524
7s [3/2] ^o	122479	3	4p [3/2]	106238	5	$1.491 \cdot 10^5$	1	615.73
7s [3/2] ^o	122479	3	4p [1/2]	107054	1	$9.8 \cdot 10^4$	a,e	648.114
7s [3/2] ^o	122479	3	4p [1/2]	107054	1	$2.477 \cdot 10^5$	1	648.30
7s [3/2] ^o	122479	3	4p' [3/2]	107132	3	$5.6 \cdot 10^4$	a	651.385
7s [3/2] ^o	122479	3	5p [1/2]	117563	1	$1.178 \cdot 10^5$	1	2034.17
7s [3/2] ^o	122479	3	5p [1/2]	116660	3	$1.109 \cdot 10^5$	1	1718.51
7s [3/2] ^o	122479	3	5p [3/2]	117151	3	$4.287 \cdot 10^5$	1	1876.86
7s [3/2] ^o	122479	3	5p [3/2]	117184	5	$8.327 \cdot 10^4$	1	1888.57
7s [3/2] ^o	122479	3	5p [5/2]	116999	5	$8.509 \cdot 10^5$	1	1824.82
7s [3/2] ^o	122479	3	6p [1/2]	121470	1	$1.150 \cdot 10^5$	1	9910.80
7s [3/2] ^o	122479	3	6p [1/2]	121069	3	$8.944 \cdot 10^4$	1	7092.19
7s [3/2] ^o	122479	3	6p [3/2]	121257	3	$3.840 \cdot 10^5$	1	8183.30
7s [3/2] ^o	122479	3	6p [3/2]	121271	5	$7.566 \cdot 10^4$	1	8278.14
7s [3/2] ^o	122479	3	6p [5/2]	121192	5	$7.857 \cdot 10^5$	1	7770.01
7s [3/2] ^o	122479	3	3p ⁶ 1S	0	1	$3.53 \cdot 10^7$	m	81.646
4p [1/2]	104102	3	4s [3/2] ^o	93751	3	$6.0 \cdot 10^6$	a	965.778
4p [1/2]	104102	3	4s [3/2] ^o	93751	3	$3.457 \cdot 10^6$	1	966.09
4p [5/2]	105617	5	4s [3/2] ^o	93751	3	$2.33 \cdot 10^7$	a	842.456
4p [5/2]	105617	5	4s [3/2] ^o	93751	3	$2.802 \cdot 10^7$	1	842.74
4p [3/2]	106087	3	4s [3/2] ^o	93751	3	$2.77 \cdot 10^7$	a	810.369
4p [3/2]	106087	3	4s [3/2] ^o	93751	3	$2.889 \cdot 10^7$	1	810.64
4p [3/2]	106238	5	4s [3/2] ^o	93751	3	$4.68 \cdot 10^6$	a	800.616
4p [3/2]	106238	5	4s [3/2] ^o	93751	3	$3.582 \cdot 10^6$	1	800.83
4p [1/2]	107054	1	4s [3/2] ^o	93751	3	$4.30 \cdot 10^7$	a,e	751.465
4p [1/2]	107054	1	4s [3/2] ^o	93751	3	$4.208 \cdot 10^7$	1	751.71
4p' [3/2]	107290	5	4s [3/2] ^o	93751	3	$8.7 \cdot 10^6$	a,e	738.398
5p [3/2]	117151	3	4s [3/2] ^o	93751	3	$8.4 \cdot 10^5$	a,e	427.217
5p [3/2]	117151	3	4s [3/2] ^o	93751	3	$2.259 \cdot 10^6$	1	427.35
5p [1/2]	117563	1	4s [3/2] ^o	93751	3	$2.76 \cdot 10^6$	a,e	419.832
5p [1/2]	117563	1	4s [3/2] ^o	93751	3	$6.432 \cdot 10^6$	1	419.96
4s [3/2] ^o	93751	3	3p ⁶ 1S	0	1	$1.19 \cdot 10^8$	a	106.666

Tabelle 5d: Übergangswahrscheinlichkeiten A_{ji} für atomare Übergänge im neutralen Argon (Quellen s. S. 43)

2.2.3 Anregung durch Elektronenstöße

2.2.3.1 Vorbemerkung

Die Anregung von Atomen im Zustand n zum Zustand n' durch Elektronenstoß spielt in dem betrachteten EZR-Plasma eine wichtige Rolle; die Kenntnis der Ratenkoeffizienten für diese Stoßprozesse ist also notwendig zur Lösung der Bilanzgleichung eines atomaren Zustandes n' . Der Ratenkoeffizient R_{ec} dieses Prozesses lautet:

$$R_{ec} = \langle \sigma_{nn'} v_e \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \sigma_{nn'}(E) v_e f(\vec{v}) d^3 v}{\int_{-\infty}^{+\infty} f(\vec{v}) d^3 v} \quad (79)$$

v_e ist die Elektronengeschwindigkeit und $f(\vec{v})$ die Elektronenverteilungsfunktion. Der von der Stoßenergie abhängige Wirkungsquerschnitt für die Anregung eines Atoms im Zustand n in den höherenergetischen Zustand n' durch Elektronenstoß wird mit $\sigma_{nn'}(E)$ bezeichnet. Im folgenden werden zuerst quantenmechanische Bestimmungen dieses Wirkungsquerschnitts $\sigma_{nn'}(E)$ vorgestellt und anschließend die Form der Elektronenverteilungsfunktion $f(\vec{v})$ bzw. $F(E)$ diskutiert.

2.2.3.2 Berechnungen von Elektronenstoßanregungs- Wirkungsquerschnitten

Betrachtet wird folgender Stoßprozeß: Ein Elektron bewegt sich mit der Geschwindigkeit $v = \hbar k / m_e$ auf ein ruhendes Atom der Kernladung Z zu, das sich in einem Zustand der Energie E_n befindet. Das freie Elektron gerät bei genügend kleinen Abständen zum Atom in den Einflußbereich des atomaren Wechselwirkungspotentials $V(\vec{R}, \vec{r}_j)$, wobei $\vec{R}$ den Ortsvektor des stoßenden Elektrons, vom Kern aus gerechnet, und $\vec{r}_j$ den Ortsvektor des j -ten Atom-elektrons bezeichnet. Es kommt zur Anregung des Atoms in den Zustand $E_{n'}$ auf Kosten der kinetischen Energie des stoßenden Elektrons, die jetzt $(\hbar k')^2 / 2 m_e$ beträgt.

Die stationäre Schrödinger-Gleichung für dieses Atom/ Elektron-System lautet:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \vec{\nabla}_R^2 + H(\vec{r}_j) - V(\vec{R}, \vec{r}_j) + E_{\text{ges}} \right] \Psi(\vec{R}, \vec{r}_j) = 0. \quad (80)$$

Dabei ist $-\frac{\hbar^2}{2\mu} \vec{\nabla}_R^2$ der Hamilton-Operator der kinetischen Energie des stoßenden Elektrons, $H(\vec{r}_j)$ der Hamilton-Operator des Atoms und E_{ges} die Gesamtenergie des Systems. Die Wellenfunktionen $\Psi(\vec{R}, \vec{r}_j)$ lassen sich aus den Wellenfunktionen $\psi_n(\vec{r}_j)$ entwickeln, die die Eigenwertgleichung (81) erfüllen.

$$H(\vec{r}_j) \psi_n(\vec{r}_j) = E_n \psi_n(\vec{r}_j). \quad (81)$$

Dieser Separationsansatz lautet dann:

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}_j) = \sum_n F_n(\vec{R}) \psi_n(\vec{r}_j). \quad (82)$$

Dabei ist die Summation über alle diskreten und die Integration über alle kontinuierlichen Eigenzustände durchzuführen. Für große Abstände des stoßenden Elektrons vom Streuzentrum läßt sich die Gesamtwellenfunktion als Überlagerung der einfallenden Welle $\Phi(\vec{k}, \vec{R}) \sim e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}$ mit einer auslaufenden Kugelwelle darstellen (Moiseiwitsch 1968, Sommerfeld 1966):

$$F_{n'}(\vec{R}) \sim e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \delta_{nn'} + f_{nn'}(\Omega) e^{i\vec{k}' \cdot \vec{R}} * \frac{1}{|\vec{R}|}. \quad (83)$$

$f_{nn'}$ ist die vom Raumwinkel Ω abhängige Streuamplitude. Der Wirkungsquerschnitt $\sigma_{nn'}$ läßt sich über folgende Beziehung berechnen:

$$\frac{d\sigma_{nn'}}{d\Omega} = \frac{k'}{k} |f_{nn'}(\Omega)|^2, \quad (84)$$

$$\sigma_{nn'} = \frac{k'}{k} |f_{nn'}(\Omega)|^2 4\pi, \quad (85)$$

$$f_{nn'}(\Omega) = \frac{1}{2\pi} \langle \Phi(\vec{k}', \vec{R}) \psi_{n'}(\vec{r}_j) | V(\vec{R}, \vec{r}_j) | \Phi(\vec{k}, \vec{R}) \psi_n(\vec{r}_j) \rangle. \quad (86)$$

Man kann nun den Potentialterm $1/|\vec{R} - \vec{r}_j|$ als Multipolentwicklung wie folgt darstellen (Seaton 1962):

$$\frac{1}{|\vec{R} - \vec{r}_j|} = \sum_{\lambda} P_{\lambda}(\vec{R} * \vec{r}_j) \frac{r_{<}^{\lambda}}{r_{>}^{\lambda+1}} \quad (87)$$

Dabei ist $r_{<}^{\lambda} \equiv \min(\vec{R}, \vec{r}_j)$ und $r_{>}^{\lambda+1} \equiv \max(\vec{R}, \vec{r}_j)$; $P_{\lambda}(\vec{R} * \vec{r}_j)$ sind Legendre'sche Polynome. Für optisch erlaubte Übergänge ist der einzige nicht-verschwindende Term dieser Multipolentwicklung der Dipolterm mit $\lambda = 1$. Für große $\vec{R}$ lautet damit die asymptotische Form des Wechselwirkungspotentials

$$\frac{1}{|\vec{R} - \vec{r}_j|} = \frac{\vec{R} * \vec{r}_j}{R^3} \quad (88)$$

Damit ergibt sich die Formel für den Wirkungsquerschnitt wie folgt:

$$\sigma_{nn'} = \frac{a_0^2 k'}{12 \pi k} \sum_j \int |\langle \phi(\vec{k}', \vec{R}) | \frac{\vec{R}}{R^3} | \phi(\vec{k}, \vec{R}) \rangle|^2 d^3 k' \cdot |\langle \psi_{n'}(\vec{r}_j) | \vec{r}_j | \psi_n(\vec{r}_j) \rangle|^2 \quad (89)$$

Der Dipol-Beschleunigungsterm $\langle \phi(\vec{k}', \vec{R}) | \vec{R}/R^3 | \phi(\vec{k}, \vec{R}) \rangle$ beschreibt die Emission eines Photons durch die Wechselwirkung des stoßenden Elektrons mit den Atomelektronen in einem frei-frei Übergang, der Dipol-Längenterm $\langle \psi_{n'}(\vec{r}_j) | \vec{r}_j | \psi_n(\vec{r}_j) \rangle$ die sofortige Absorption dieses Photons im Übergang vom Zustand n zum Zustand n' . Führt man nun den Gaunt-Faktor (Kramers-Gauntschen g-Faktor)

$$g(k, k') = \frac{k k' \sqrt{3} a_0^2}{32 \pi^4} \int |\langle \phi(\vec{k}', \vec{R}) | \frac{\vec{R}}{R^3} | \phi(\vec{k}, \vec{R}) \rangle|^2 d^3 k \quad (90)$$

und die Oszillatorenstärke

$$f_{nn'} = \frac{2}{3} (E_{n'} - E_n) |\langle \psi_{n'}(\vec{r}_j) | \vec{r}_j | \psi_n(\vec{r}_j) \rangle|^2 (2 h c R_H a_0^2)^{-1} \quad (91)$$

ein, so erhält man den Wirkungsquerschnitt für Elektronenstoßanregung

$$\sigma_{nn'} = \frac{4 \pi^2}{k^2 \sqrt{3}} * \frac{f_{nn'}}{(E_{n'} - E_n)} * g(k, k') * 2 h c R_H \quad (92)$$

Ist das Störpotential des Atoms hinreichend klein, kann der Zustand des Elektrons, das sich nach dem Stoß vom Kern entfernt, näherungsweise durch eine ebene Welle beschrieben werden. Bei Verwendung dieser 1. Bornschen Näherung erhält der Gaunt-Faktor dann die Form:

$$g(k, k') = \frac{\sqrt{3}}{\pi} * \ln \left(\frac{k + k'}{|k - k'|} \right). \quad (93)$$

Für Stöße niederenergetischer Elektronen mit Atomen existieren semiempirische Ansätze, bei denen ein effektiver Gaunt-Faktor $\bar{g}(k, k')$ eingeführt wird, der für bekannte Wirkungsquerschnitte rekursiv bestimmt wird (Seaton 1962, Van Regemorter 1962, Kato 1977). Die Formel für den Wirkungsquerschnitt der Elektronenstoßanregung lautet damit:

$$\sigma_{nn'} = \frac{4\pi^2}{k^2 \sqrt{3}} * \frac{f_{nn'}}{(E_{n'} - E_n)} * \bar{g}(k, k') * 2hcR_H. \quad (94)$$

Betrachtet man den Spezialfall der Stöße hochenergetischer Elektronen mit $E \gg (E_{n'} - E_n)$, ergibt sich ein Gaunt-Faktor

$$g(k, k') = \frac{\sqrt{3}}{\pi} * \ln \left(\frac{4E}{E_{n'} - E_n} \right). \quad (95)$$

Die daraus resultierende, für hohe Energien gültige Approximation des Wirkungsquerschnitts ist auch als Bethe-Näherung bekannt (Bethe 1930). Sie gilt jedoch streng nur für solche Stöße, bei denen die Kernladungszahl hinreichend klein, die Stoßenergie des Elektrons hinreichend groß und damit die Wechselwirkung zwischen Atom und Stoßelektron hinreichend gering ist.

Zur konkreten Berechnung der Wirkungsquerschnitte derjenigen Elektronenstoß-Anregungsprozesse, die im EZR-Plasma eine Rolle spielen, wurde in Anlehnung an Marlinghaus (1984) ein Rechenprogramm geschrieben, das im Bereich niederenergetischer Stöße mit einem tabellierten effektiven Gaunt-Faktor (Van Regemorter 1962) und im Bereich hochenergetischer Stöße mit der Bethe-Näherung (Gleichung (95)) arbeitet. In dem Energiebereich $36 * (E_{n'} - E_n) < E < 64 * (E_{n'} - E_n)$, in dem sowohl die semiempirische Regemorter-Näherung als auch die Bethe-Näherung gilt, wurden beide Approximationen durch einen Korrekturfaktor aneinander angepaßt.

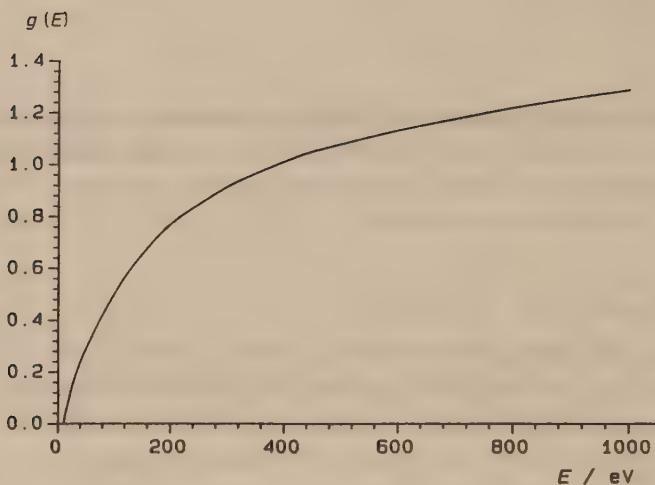


Abb. 13a: Berechneter effektiver Gaunt-Faktor $g(E)$ für Elektronenstoßanregung des Zustandes $\text{Ar}^*(4s' [1/2]^0)$ aus dem Grundzustand ($\lambda = 104.8 \text{ nm}$)

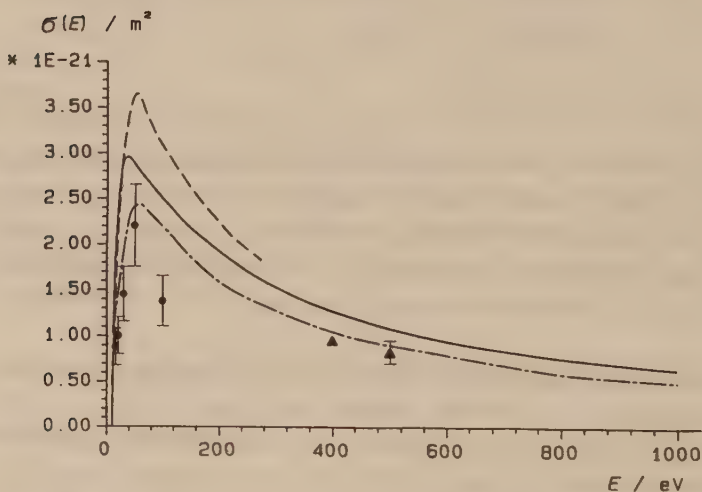


Abb. 13b: Wirkungsquerschnitt $\sigma(E)$ für Elektronenstoßanregung des Zustandes $\text{Ar}^*(4s' [1/2]^0)$ aus dem Grundzustand: Berechnung nach Gleichung (93) bis (95) (—) und Meßdaten von Mentall/Morgan (- - -), McConkey/Donaldson (— · —), Chutjian/Cartwright (●), Li et al. (▲)

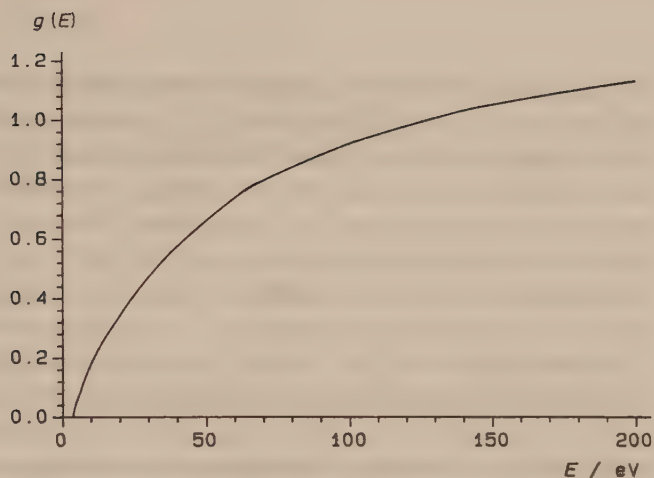


Abb. 14a: Berechneter effektiver Gaunt-Faktor $g(E)$ für Elektronenstoßanregung des Zustandes $\text{Cu}^*(4p^2P_{3/2})$ aus dem Grundzustand ($\lambda = 324.75 \text{ nm}$)

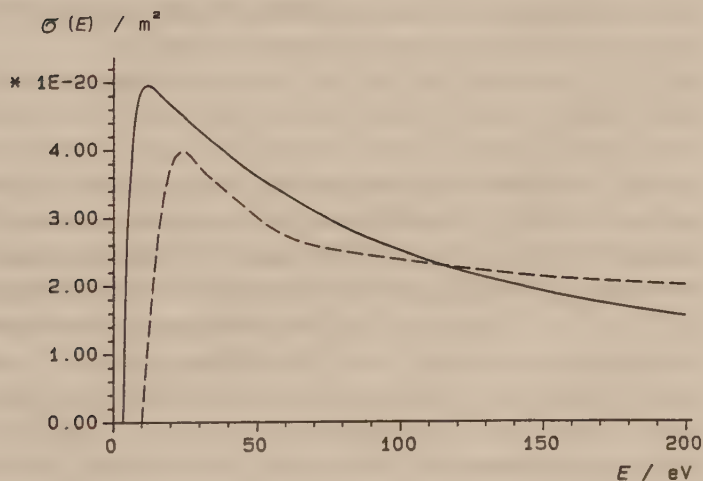


Abb. 14b: Wirkungsquerschnitt $\sigma(E)$ für Elektronenstoßanregung des Zustandes $\text{Cu}^*(4p^2P_{3/2})$ aus dem Grundzustand: Berechnung nach Gleichung (93) bis (95) (—) und Meßdaten von Borozdin/Smirnov/Sharonov (- - -)

Ein Vergleich errechneter Daten mit Meßdaten verschiedener Autoren (s. Abb. 13 b und Abb. 14 b) zeigt, daß die Abweichung der errechneten Wirkungsquerschnitte von den gemessenen in der gleichen Größenordnung liegt wie die Abweichung gemessener Daten untereinander. Die Anwendung der kombinierten Regemorter/Bethe-Näherung erscheint daher als ein geeignetes Verfahren, Elektronenstoßanregungs-Wirkungsquerschnitte auch gerade von jenen Stoßprozessen zu berechnen, von denen keine experimentellen Vergleichsdaten vorliegen.

2.2.3.3 Die Elektronenenergie-Verteilungsfunktion $F(E)$

Zur Berechnung der Elektronenstoßanregungs-Ratenkoeffizienten $\langle \sigma_{nn'} \cdot v_e \rangle$ wird neben dem Elektronenstoßanregungs-Wirkungsquerschnitt $\sigma_{nn'}(E)$ die Elektronenenergie-Verteilungsfunktion $F(E)$ benötigt.

Die Auswertung von Röntgenbremsstrahlungsspektren des EZR-Plasmas im Energiebereich oberhalb 3 keV hatten bisher ergeben, daß sich $F(E)$ nicht durch eine Maxwell-Verteilung beschreiben läßt. Die gemessenen Verteilungsfunktionen lassen sich vielmehr am ehesten durch die Form

$$F(E) \sim E^{-s} \quad (96)$$

annähern. Dabei liegt der sog. Spektralindex s zwischen 1.1 und 1.7 für Elektronenenergien $3 \text{ keV} < E < 22 \text{ keV}$ (Ziemann 1984) bzw. zwischen 3 und 4 für Elektronenenergien $80 \text{ keV} < E < 700 \text{ keV}$ (Wagner 1985). Die gemessenen Elektronendichten liegen zwischen $3 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-3}$ und $4 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-3}$ bzw. zwischen $7 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-3}$ und $2 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-3}$. Die exakte Form der Verteilungsfunktion für kleinere Elektronenenergien konnte bisher noch nicht eindeutig bestimmt werden. Bei den folgenden Rechnungen wird für diesen niederenergetischen Bereich als erster Ansatz ebenfalls eine Verteilungsfunktion $F(E) \sim E^{-s}$ mit einem Spektralindex $1 < s < 2$ angenommen.

Der Ratenkoeffizient für Elektronenstoßanregung hat damit folgende Form:

$$\langle \sigma_{nn'} v_e \rangle = \frac{\int_0^{+\infty} \sigma_{nn'}(E) \sqrt{2E/m_e} F(E) dE}{\int_0^{+\infty} F(E) dE} \quad (97)$$

Für hohe Elektronenenergien wird mit kleiner werdendem Elektronenstoßanregungs-Wirkungsquerschnitt $\sigma_{nn'}$ und wachsendem Spektralindex s der Anteil am gesamten Ratenkoeffizienten immer geringer. Bei der Berechnung der Elektronenstoß-Ratenkoeffizienten, die wiederum in die Berechnung des Elektronen-transfer-Ratenkoeffizienten eingehen, genügt also in erster Näherung eine Betrachtung des niederenergetischen Energiebereichs unterhalb 1 keV. Als untere Integralgrenze kann die Schwellenenergie gesetzt werden, bei der der Elektronenstoß-Wirkungsquerschnitt $\sigma_{nn'}$ verschwindet.

2.2.4 Bestimmung des Ratenkoeffizienten für einen Zweielektronen-transfer zwischen CuI und ArIII

Zur Bestimmung des Ratenkoeffizienten R_{trans} für den Zweielektronentransfer zwischen Cu und Ar²⁺ müssen die Bilanzgleichungen derjenigen atomaren Zustände j aufgestellt werden, die durch diesen Prozeß selektiv besetzt werden können. Wegen der geringen optischen Dicke des EZR-Plasmas können die Beiträge von Photonenstoßanregung sowie Photoionisierung in diesen Bilanzgleichungen vernachlässigt werden (s. auch Abschnitt 2.2). Die Entvölkerung der betrachteten Zustände j durch Elektronenstoßanregung in höhere Zustände $k > j$ kann als vernachlässigbar gelten, wenn gilt:

$$n^j A_{j0} \gg n_e \sum_{k>j} \langle \sigma_{jk} v_e \rangle n^j \quad (98)$$

Die Berechnung der Elektronenstoßanregungs-Ratenkoeffizienten $\langle \sigma_{jk} v_e \rangle$ wurde mit dem in Kapitel 2.2.3 beschriebenen Verfahren durchgeführt, wobei die in Abschnitt 2.2.2 aufgelisteten Übergangswahrscheinlichkeiten verwendet wurden. Die Rechnungen beziehen sich auf eine im EZR-Plasma gemessene typische Elektronendichte von $n_e = 2 \cdot 10^{17} \text{ m}^{-3}$ (Marlinghaus 1985).

Zustand j	A_{j0} / s^{-1}	$n_e \sum_{k>j} \langle \sigma_{kj} v_e \rangle / s^{-1}$
(CuI) 4p	$1.39 \cdot 10^8$	$1.09 \cdot 10^5$
(ArI) 4s $[3/2]^o$	$1.19 \cdot 10^8$	$2.34 \cdot 10^5$
(ArI) 5d $[3/2]^o$	$6.72 \cdot 10^7$	$1.56 \cdot 10^7$
(ArI) 7s $[3/2]^o$	$3.53 \cdot 10^7$	$1.50 \cdot 10^7$
(ArI) 6d $[3/2]^o$	$3.98 \cdot 10^7$	keine Daten
(ArI) 8s $[3/2]^o$	$2.42 \cdot 10^7$	keine Daten

Tabelle 6: Vergleich der Entvölkerungsmechanismen verschiedener angeregter Zustände in CuI und ArI

$(n^j A_{j0} = \text{Entvölkerung durch Strahlungsübergänge})$

$n_e \sum_{k>j} \langle \sigma_{jk} v_e \rangle / n^j = \text{Entvölkerung durch Elektronenstoßanregung in höhere Zustände k})$

Aus den Ergebnissen der Tabelle 6 erkennt man, daß für tiefliegende Zustände von ArI und CuI sicherlich die Ungleichung (98) gültig ist. Für die hochangeregten Zustände $5d[3/2]^o$ und $7s[3/2]^o$ liegen A_{j0} und $n_e \sum \langle \sigma_{kj} v_e \rangle$ in gleicher Größenordnung, elektronenstoßinduzierte Übergänge von diesen Zuständen in höherenergetische Zustände k können also nicht unbedingt vernachlässigt werden. Ähnlich wird es sich für die energetisch eng benachbarten Zustände $6d[3/2]^o$ und $8s[3/2]^o$ verhalten; es existieren jedoch keine Daten für Übergänge von diesen Niveaus in höhere Niveaus k. Für den Entvölkerungsterm A_{j0} des Zustandes 6d wird ebenso wie beim Zustand 5d ein Fehler von 20 % angenommen.

Die Bevölkerung der Zustände j kann durch Elektronenstoßanregung aus tieferliegenden angeregten Zuständen i und aus dem Grundzustand erfolgen. Die Besetzung erfolgt in erster Linie durch Elektronenstoßanregung aus dem Grundzustand, wenn gilt:

$$n_e n^0 \langle \sigma_{0j} v_e \rangle \gg n_e \sum_{i>j} \langle \sigma_{ij} v_e \rangle n^i . \quad (99)$$

Zustand j	$n^0 < \sigma_{0j} v_e >$ (s ⁻¹)	Zustand i	$n^i < \sigma_{ij} v_e >$ (s ⁻¹)
(CuI) 4p	4.16	4s ² 2D _{5/2}	s. Text
(ArI) 4s [3/2] ^o	1.79 * 10 ⁻¹	-----	0
(ArI) 5d [3/2] ^o	3.73 * 10 ⁻²	5p [3/2] ^o	4 * 10 ⁻⁷ - 4 * 10 ⁻⁶
(ArI) 7s [3/2] ^o	1.96 * 10 ⁻²	6p [5/2] ^o	1 * 10 ⁻⁴ - 1 * 10 ⁻³
(ArI) 6d [3/2] ^o	2.11 * 10 ⁻²	5p [3/2] ^o	5 * 10 ⁻⁸ - 5 * 10 ⁻⁷
(ArI) 8s [3/2] ^o	1.28 * 10 ⁻²	6p [3/2] ^o	4 * 10 ⁻⁶ - 4 * 10 ⁻⁵

Tabelle 7: Vergleich der Bevölkerungsmechanismen verschiedener Zustände j

$$\begin{aligned}
 (n_e n^i < \sigma_{ij} v_e >) &= \text{Bevölkerung durch Elektronenstoßanregung} \\
 &\quad \text{aus einem tieferliegenden Zustand i /} \\
 n_e n^0 < \sigma_{0j} v_e > &= \text{Bevölkerung durch Elektronenstoßanregung} \\
 &\quad \text{aus dem Grundzustand j}
 \end{aligned}$$

In Tabelle 7 sind diejenigen Zustände i aufgeführt, von denen mit maximalem Wirkungsquerschnitt σ_{ij} ein elektronenstoßinduzierter Übergang zum jeweiligen Zustand j erfolgen kann. Für Übergänge von p-Zuständen (der Zustandsdichte n^i) in die betrachteten d- und s-Zustände (der Zustandsdichte n^j) wurden Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen 10⁻⁷ und 10⁻⁸ s⁻¹ angenommen. Die typische Dichte n^0 des Grundzustandes ergab sich aus spektroskopischen Messungen (s. Abschnitt 4.3), die Dichten n^i der Zustände i wurden über tabellierte Intensitätsverhältnisse der Resonanzlinien abgeschätzt (Kelly 1982).

Für den CuI- Zustand 4p ist $\langle \sigma_{0j} v_e \rangle = 1,25 * 10^{-13} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ und $\sum \langle \sigma_{ij} v_e \rangle = 3,6 * 10^{-15} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, so daß sicherlich wegen $n^0 > n^i$ auch Ungleichung (99) gilt. Für alle anderen Fälle gilt diese Ungleichung ebenfalls, wie man aus Tabelle 7 entnehmen kann. Die Stoßanregung bereits angeregter Zustände i hat bei Betrachtung der oben aufgeführten Zustände also keinen nennenswerten Anteil an der Bevölkerung dieser angeregten Zustände.

Auch Rekombinationsprozesse haben keinen Einfluß auf die Besetzung der angeregten ArI-Zustände, da für Elektronentemperaturen zwischen 20 eV und 50 eV das Produkt aus Elektronendichte n_e und Rekombinationskoeffizient α zwischen 0.1075 s⁻¹ und 0.0679 s⁻¹ liegt.

Die Bevölkering der Niveaus j erfolgt also in erster Linie durch Elektronenstoßanregung aus dem Grundzustand und durch Umladungsstöße $\text{Ar}^{2+} + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^* + \text{Cu}^{2+}$. Es müssen jedoch auch Beiträge aus höherliegenden Zuständen k , die ebenfalls durch Elektronenstoß aus dem Grundzustand besetzt werden, berücksichtigt werden. Die Entvölkering der Zustände j geschieht durch Strahlungsübergänge in tieferliegende Zustände i . Damit lautet die Bilanzgleichung für einen solchen angeregten Zustand:

$$\begin{aligned}
 n_e n_{\text{ArI}}^0 & \left\langle \left[\sigma_{0j} + \sum_{k>j} \sigma_{0k} \frac{A_{kj}}{\sum_{i<k} A_{ki}} \right] v_e \right\rangle \\
 + n_{\text{CuI}}^0 n_{\text{ArIII}}^0 & \left\langle \sigma_{\text{trans}} (v_{\text{ArIII}} - v_{\text{CuI}}) \right\rangle \\
 - n_{\text{ArI}}^j * \left(A_{j0} + \sum_{i<j} A_{ij} + n_e \sum_{k>j} \langle \sigma_{kj} v_e \rangle \right) & = 0. \quad (100)
 \end{aligned}$$

Die Dichte n_{ArIII} wurde durch Messung der Ladungszustandsverteilung des EZR-Plasmas in Abhängigkeit von verschiedenen Plasmaparametern (Marlinghaus 1985) bestimmt. Die Elektronendichte n_e läßt sich ebenfalls aus diesen Messungen mit Hilfe der Quasineutralitätsbedingung des Plasmas ermitteln:

$$n_e = \sum_{z=1}^{18} z * n_{\text{Ar}^{z+}}. \quad (101)$$

Die Strahlungsterme $n_{\text{ArI}}^j * A_{j0}$ lassen sich direkt aus den Linienintensitäten spektroskopischer Messungen bestimmen.

Die Dichte des Grundzustandes des neutralen Argons n_{ArI}^0 sowie des neutralen Kupfers n_{CuI}^0 kann man aus den Bilanzgleichungen energetisch tiefliegender Zustände beider Systeme gewinnen. Diese Zustände sollten energetisch nahe beim Grundzustand liegen, die Spektrallinie des Strahlungsübergangs in den Grundzustand sollte gut trennbar von benachbarten Linien sein und die genauen atomaren Daten dieser Zustände sollten vorhanden sein. Im atomaren System des neutralen Argons kommt somit der Zustand $[^2\text{P}_{3/2}^0] 4s [3/2]^o$ und im neutralen Kupfer der Zustand $^2\text{P}_{3/2}^0 4p$ in Frage.

Auch bei Aufstellung der Bilanzgleichungen dieser beiden Zustände j_1 (für ArI $4s[3/2]^0$) und j_2 (für CuI $^2P_{3/2}^o 4p$) braucht Photoionisierung, Rekombination und Elektronenstoßanregung bereits angeregter Niveaus i_1, i_2 bzw. k_1, k_2 nicht berücksichtigt zu werden, wie die Daten in Tabelle 7 zeigen.

Die umgeformten Bilanzgleichungen lauten dann:

$$n_{\text{ArI}}^0 = \frac{n_{\text{ArI}}^{j_1} \left(A_{j_1 0} + \sum_{i_1 < j_1} A_{i_1 j_1} \right)}{n_e \left\langle \left[\sigma_{0j_1} + \sum_{k_1 > j_1} \sigma_{0k_1} \frac{A_{k_1 j_1}}{\sum_{i_1 < k_1} A_{k_1 i_1}} \right] v_e \right\rangle} \quad (102)$$

$$n_{\text{CuI}}^0 = \frac{n_{\text{CuI}}^{j_2} \left(A_{j_2 0} + \sum_{i_2 < j_2} A_{i_2 j_2} \right)}{n_e \left\langle \left[\sigma_{0j_2} + \sum_{k_2 > j_2} \sigma_{0k_2} \frac{A_{k_2 j_2}}{\sum_{i_2 < k_2} A_{k_2 i_2}} \right] v_e \right\rangle} \quad (103)$$

Für alle betrachteten Zustände j gilt ferner $A_{j0} > \sum_{i < j} A_{ij}$, wie man aus Tabelle 8 entnehmen kann.

Zustand j	A_{j0} / s^{-1}	$\sum_{i < j} A_{ij} / s^{-1}$
(CuI) 4p	$1.39 \cdot 10^8$	$2.24 \cdot 10^6$
(ArI) 4s $[3/2]^0$	$1.19 \cdot 10^8$	0
(ArI) 5d $[3/2]^0$	$6.72 \cdot 10^7$	$7.02 \cdot 10^5$
(ArI) 7s $[3/2]^0$	$3.53 \cdot 10^7$	$5.57 \cdot 10^6$
(ArI) 6d $[3/2]^0$	$3.98 \cdot 10^7$	$1.83 \cdot 10^5$
(ArI) 8s $[3/2]^0$	$2.42 \cdot 10^7$	$2.97 \cdot 10^6$

Tabelle 8: Übergangswahrscheinlichkeiten für atomare Übergänge von verschiedenen Zuständen j in tieferliegende Zustände i und in den Grundzustand 0

Durch Einsetzen der Gleichungen (102) und (103) in Gleichung (100) ergibt sich damit schließlich der Ratenkoeffizient R_{trans} für den Zweielektronentransfer $\text{Ar}^{2+} + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^*(j) + \text{Cu}^{2+}$ folgendermaßen:

$$\begin{aligned}
 R_{\text{trans}} &= \left\langle \sigma_{\text{trans}} (v_{\text{ArIII}} - v_{\text{CuI}}) \right\rangle = \\
 &= \left[n_{\text{ArI}}^j * \left(A_{j0} + \sum_{l < j} A_{lj} + n_e \sum_{k > j} \langle \sigma_{kj} v_e \rangle \right) \right. \\
 &\quad \left. - n_e n_{\text{ArI}}^0 \left\langle \left[\sigma_{0j} + \sum_{k > j} \sigma_{ok} \frac{A_{kj}}{\sum_{l < k} A_{kl}} \right] v_e \right\rangle \right] * (n_{\text{CuI}}^0 n_{\text{ArIII}}^0)^{-1} \\
 &= \left[n_{\text{ArI}}^j * \left(A_{j0} + \sum_{l < j} A_{lj} + n_e \sum_{k > j} \langle \sigma_{kj} v_e \rangle \right) - n_{\text{ArI}}^{j_1} A_{j_1 0} * \frac{\langle 0, j \rangle}{\langle 0, j_1 \rangle} \right] \\
 &\quad * \frac{\langle 0, j_2 \rangle n_e}{n_{\text{CuI}}^{j_2} \left(A_{j_2 0} + \sum_{l_2 < j_2} A_{l_2 j_2} \right) n_{\text{ArIII}}^0} \quad (104)
 \end{aligned}$$

$$\text{mit } \langle 0, j \rangle \equiv \left\langle \left[\sigma_{0j} + \sum_{k > j} \sigma_{ok} \frac{A_{kj}}{\sum_{l < k} A_{kl}} \right] v_e \right\rangle. \quad (105)$$

Die in diese Gleichung eingehenden Übergangswahrscheinlichkeiten A_{k1} sind vollständig in den Tabellen 4 und 5 des Abschnitts 2.2.2 aufgeführt. Die Berechnung aller Elektronenstoßanregungs-Wirkungsquerschnitte σ_{0j} erfolgt unter Verwendung dieser Daten (s. Abschnitt 2.2.3.2). Für die Elektronenenergie-Verteilungsfunktion wird aufgrund von Messungen des Bremsstrahlungskontinuums die Näherung $F(E) \sim E^{-a}$ angenommen (s. Abschnitt 2.2.3.3). Als Meßgrößen schließlich gehen die Elektronendichte n_e und die Besetzungsdichten verschiedener angeregter Zustände des neutralen Argons und des neutralen Kupfers ein. Der apparative Aufbau und die Ergebnisse spektroskopischer Messungen werden in den folgenden Abschnitten diskutiert.

3. APPARATIVER AUFBAU

3.1 ELEKTRON-ZYKLOTRON-RESONANZ-ENTLADUNG

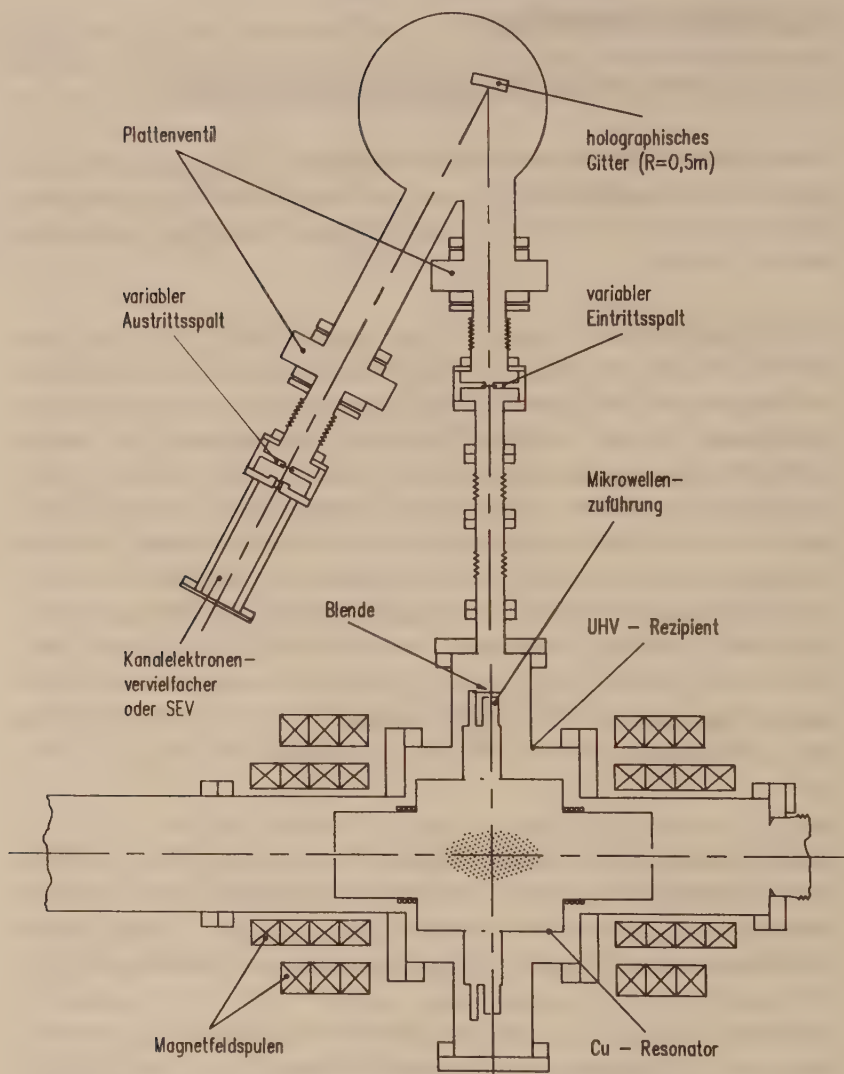
In einem rotationssymmetrischen Kupferresonator, der sich in einer stationären magnetischen Spiegelfalle befindet, wird eine Mikrowellenentladung betrieben, an der u. a. die hier diskutierten spektroskopischen Messungen durchgeführt wurden (s. Abb. 15).

Der Resonator selbst ist in einem UHV-Rezipienten installiert, der bis auf einen typischen Restgasdruck von $3 \cdot 10^{-5}$ Pa evakuiert wird. Die Zusammensetzung des Restgases wird mit Hilfe eines Quadrupol-Massenfilters kontrolliert. Das Entladungsgas (Edelgas) wird über Piezoventile wahlweise radial oder axial in den Resonator eingelassen. Die Druckmessung erfolgt in erster Linie mit Penningröhren, deren Kathoden bei hohen Arbeitsgasdrücken nur eine endliche Lebensdauer besitzen und deshalb gelegentlich ausgetauscht werden müssen. Da jedoch die Charakteristik der Kathoden untereinander deutliche Unterschiede aufweisen, werden die Penningröhren nach jedem Kathodenaustausch mit Hilfe einer absolut kalibrierten Ionivacröhre nachkalibriert. Mit Hilfe einer in der Bochumer EZR-Arbeitsgruppe entwickelten Druckregelung (Wagner, Ziemann, Wiesemann 1986) kann der Neutralgasdruck, der typisch zwischen $2.7 \cdot 10^{-3}$ Pa und $1.33 \cdot 10^{-1}$ Pa liegt, auch während langer Betriebszeiten der Entladung konstant gehalten werden.

Am Kupferresonator befinden sich 3dB-Koppler, durch die eine mittlere maximale Mikrowellenleistung von 2.5 kW wahlweise im Dauerstrich- oder Pulsbetrieb radial eingespeist werden kann. Eingespeiste und reflektierte Leistung werden mit Richtkopplern und Thermistor-Meßbrücken bzw. Mikrowellendioden gemessen.

Außerhalb des Rezipienten sind zwei Magnetfeldspulenpaare mit getrennten Stromversorgungen angebracht, so daß Magnetfeldstärke (0 - 0.7 T im Maximum) und Spiegelverhältnis (2.5 - 5) der Magnetfeldkonfiguration variabel sind. Bei entsprechender Einstellung der Spulenströme liegen die Resonanzzonen, in denen die Elektronengyrationsfrequenz $\nu_c = eB / 2\pi m_e$ mit der Mikrowellenfrequenz $\nu_{MW} = 9.72$ GHz übereinstimmt, innerhalb des Mikrowellenresonators.

VUV – Monochromator



EZR – Entladung

Abb. 15: Bochumer Elektron-Zyklotron-Resonanz-Entladung mit VUV-Monochromator

In diesen Resonanzzonen erfolgt Plasmazündung und - nach dem derzeitigen Stand der experimentellen Untersuchungen (Bernhardi, Wiesemann 1982; Wagner 1986; Ziemann 1984; Bernhardi, Brinkmann 1988) - stochastische Aufheizung der Elektronen auf Energien bis zu 1 MeV. Zur Abschirmung der Röntgenbremsstrahlung, die aus Stößen der hochenergetischen Elektronen mit Resonatorwand, Plasmaionen und -atomen entsteht, ist das gesamte Plasmagefäß mit einem 5 - 10 cm dicken Bleimantel umhüllt.

3.2 VUV-SPEKTROMETER UND MESSELEKTRONIK

Senkrecht zur Magnetfeldachse ist an den UHV-Rezipienten der EZR-Entladung ein differentiell gepumptes VUV-Spektrometer angeschlossen, das bis auf einen typischen Restgasdruck von $2 \cdot 10^{-3}$ Pa differentiell evakuiert wird (s. Abb. 15).

Durch eine Bohrung in der Mikrowellenzuführung am Resonator wird mit diesem Spektrometer bei einer typischen Eintrittsspaltbreite von $30 \mu\text{m}$ ein Raumwinkel von $1.28 \cdot 10^{-7}$ sr und damit ein Plasmavolumen von 13.8 cm^3 beobachtet. Für Messungen im Spektralbereich von 30 bis 130 nm wird ein holographisches Platingitter mit 3600 Strichen/mm und ein Kanalelektronenvervielfacher (Channeltron Valvo B 314 BL) als Detektor verwendet. Bei einer Eintrittsspaltbreite von $10 \mu\text{m}$ beträgt die maximale reale Auflösung des Spektrometers mit diesem Gitter ca. 0.03 nm. Für höhere Wellenlängen (100-550 nm) steht ein holographisches AlMgF₂-Gitter mit 1200 Strichen/mm und ein Sekundärelektronenvervielfacher (Photomultiplier EMI 6256 QA) zur Verfügung. Die spezielle Konstruktion der Gitter- und der Detektorhalterungen erlaubt einen reproduzierbaren Gitter- und Detektorwechsel ohne Neujustierung.

Die vom Photomultiplier bzw. Channeltron gelieferten Signale werden durch Vorverstärker, Hauptverstärker und Einkanaldiskriminator verstärkt, geformt und zu auswertbaren TTL-Pulsen umgewandelt (s. Abb. 16). Auf einem zwischen Hauptverstärker und Einkanaldiskriminator geschalteten Oszilloskop wird die Linienform der Signale kontrolliert. Die vom Einkanaldiskriminator erzeugten TTL-Pulse können über einen MCS-Adapter in einen intelligenten Vielkanalanalysator (kurz: VKA) eingelesen werden.

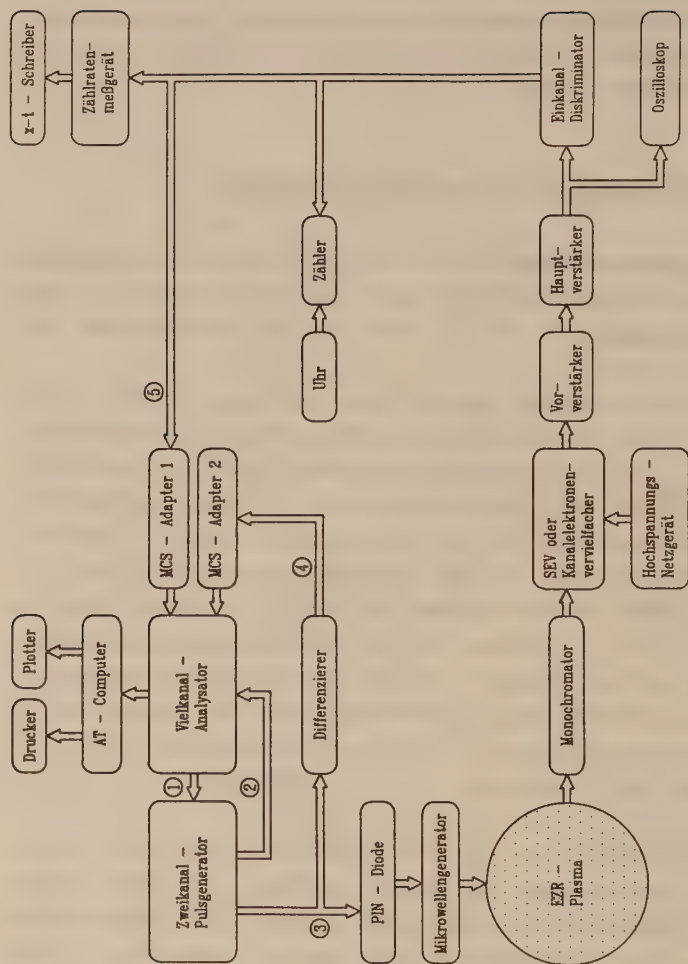


Abb. 16: Blockschaubild der VUV-Diagnostik und Experimentsteuerung

Im Dauerstrichbetrieb der Gasentladung bei konstanten Plasmaverhältnissen können somit im Multi-Channel-Scaling-Betrieb dieses VKAs Wellenlängenspektren aufgenommen werden. Ersatzweise wird für die Registrierung von Spektren auch ein Ratemeter mit X-t-Schreiber verwendet. Bei Langzeitmessungen von Intensitäten schwacher Spektrallinien wird anstelle des Vielkanalanalysators oder des Ratemeters ein Zähler eingesetzt, dessen Meßzeit an einem externen Zeitgeber eingestellt werden kann.

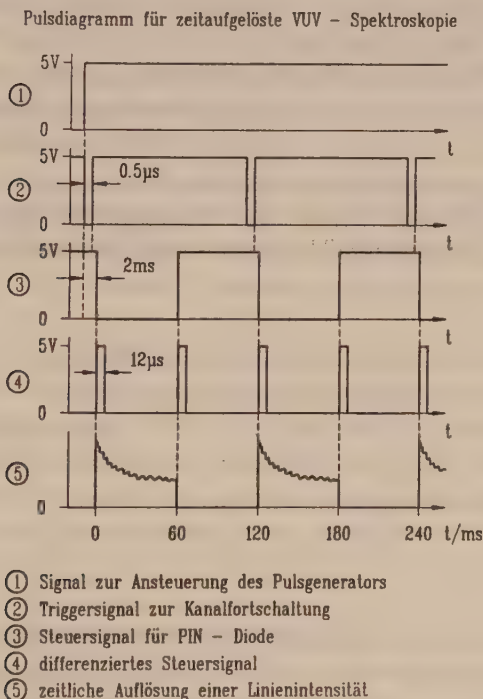


Abb. 17: Pulsdiagramm für zeitaufgelöste VUV-Spektroskopie an der EZR-Entladung

Bei gepulster Entladung dient der Vielkanalanalysator (VKA) auch zur Steuerung eines Pulsgenerator, der eine PIN-Diode alternierend für 60 ms durchschaltet und für weitere 60 ms sperrt (s. Abb. 16).

Im durchgeschalteten Zustand dieser PIN-Diode steuert die in einem Reflexklystron erzeugte Mikrowellenleistung ein Verstärkerklystron an, dessen Ausgangsleistung in den Mikrowellenresonator eingekoppelt wird und das Plasma erzeugt. Die Triggerung der VKA-Kanalfortschaltung erfolgt entsprechend nach jeweils 120 ms, so daß über viele Pulse immer wieder in dieselben Kanäle eingelesen wird. Bei dieser Meßanordnung wird die zeitliche Auflösung einer Linienintensität durch Mittelung über typisch 500 Pulse bestimmt.

Zur genauen Messung der Zeitpunkte, an denen das Plasma gezündet wird bzw. erlischt, wurde ein Differenzierer gebaut, der an den Zeitpunkten der ansteigenden und abfallenden Flanken des PIN-Dioden-Ansteuerungspulses einen TTL-Puls erzeugt, der in einen weiteren MCS-Adapter des Vielkanalanalysators eingelesen wird. Der Ansteuerungspuls für die PIN-Diode ist bezüglich des Trigger-Pulses um 2 ms verzögert, damit die Anstiegsflanke der zeitlich aufgelösten Linienintensität deutlich sichtbar wird. Parallel zur Auswertung der Signale durch den Vielkanalanalysator wird mit Ratemeter und X-t-Schreiber die mittlere Zählrate registriert, um die plasmabedingten Meßfehler zu bestimmen.

Die gesamte oben beschriebene Meßelektronik befindet sich in einer abgeschirmten Meßkabine, da u. a. durch die Phasenanschnittsteuerung der Transistornetzgeräte, die die Magnetfeldspulenströme liefern, Störpulse die Messungen verfälschen können. In der Meßkabine befindet sich ein AT-Rechner, auf den die Daten vom Vielkanalanalysator übertragen und weiter ausgewertet werden können. Die Darstellung der Meßergebnisse erfolgt wahlweise über einen Plotter oder einen Drucker.

Die absolute Nachweiswahrscheinlichkeit ε von Monochromator und Meßelektronik - also vom gesamten VUV-Spektrometer - wurde von Marlinghaus (1985) im sichtbaren Spektralbereich (300-500 nm) mit Hilfe einer Wolframbandlampe und im VUV-Bereich (40-120 nm) unter Verwendung der "branching-ratio"-Methode bestimmt. Die in dieser Arbeit diskutierten spektroskopischen Messungen wurden bei exakt denselben Geräteeinstellungen vorgenommen, mit denen die Kalibrierung des Spektrometers durchgeführt wurde.

Eine Änderung der absoluten Nachweiswahrscheinlichkeit kann sich einerseits durch einen Verstärkungsrückgang des Channeltrons, andererseits durch Verminderung der Gitterreflektivitäten ergeben. Eine Änderung der Channeltronverstärkung tritt nach Herstellerangaben (Valvo 1975) ab 10^{10} aufgelaufenen Zählungen auf. Die typischen am Plasma gemessenen Zählraten liegen jedoch zwischen 10^2 und 10^3 counts/s, wobei das verwendete Channeltron in der Sättigung betrieben wird.

Ein Verstärkungsrückgang des Channeltrons und eine Verminderung der Gitterreflektivität durch eine mögliche Verunreinigung mit Kohlenwasserstoffen kann ausgeschlossen werden, da einerseits keine kohlenstoffhaltigen Entladungsgase verwendet werden und andererseits die Bildung von Öldämpfen bei Ausfall der Vakuumpumpen apparativ verhindert wird.

Die von Marlinghaus gemessene absolute Nachweiswahrscheinlichkeit ε kann also im Rahmen der folgenden Untersuchungen verwendet werden.

4. SPEKTROSKOPISCHE MESSUNGEN AN EINEM EZR-PLASMA

4.1 VORBEMERKUNG

In den aufgenommenen UV-Übersichtsspektren verschiedener Edelgasentladungen oberhalb 300 nm wurden, wie schon bei vergangenen Messungen (Marlinghaus, Huber, Wiesemann 1983), relativ intensitätsstarke Kupferlinien gefunden, die auf eine Verunreinigung der Entladung durch abgesputtertes Resonatorwandmaterial schließen läßt. Auch die starke K_{α} -Kupfer-Linie bei 8 keV in den Röntgenspektren des EZR-Plasmas weist auf diese Plasmaverunreinigung durch das Wandmaterial Kupfer hin (Ziemann 1985). Bei Umbauarbeiten am Kupferresonator wurden auf dem Resonatorboden eine unerwartet große Menge von Kupferspänen gefunden, die von der Resonatorwand abgeplatzt waren ("Blistering"); besonders die Resonatorstirnseiten zeigten deutliche Spuren dieser Plasma-Wand-Wechselwirkung.

All dies weist darauf hin, daß das Plasma bei bestimmten Neutralgasdrücken und Mikrowellenleistungen durch eine Instabilität auf die Resonatorwand getrieben wird, was dort zu einer erhöhten Zerstäubungsrate des Wandmaterials Kupfer führt.

Gerade bei magnetischen Spiegelkonfigurationen können eine ganze Reihe von Instabilitäten auftreten, die den Plasmaeinschluß beeinträchtigen. Durch eine Anisotropie der Elektronenenergie-Verteilungsfunktion $F(E_{\perp}, E_{\parallel})$ beispielsweise können Verlustkegel-Instabilitäten (sog. "loss cone instabilities") entstehen (Fowler 1981). Außerdem kann die positive Krümmung der Spiegelmagnetfeldlinien am Plasmarand eine Rillendeformation ("flute instability", "interchange instability") (Krall, Trivelpiece 1973) hervorrufen, wodurch sich der Plasmaeinschluß ebenfalls verschlechtert. Die MHD-Stabilität von heißen Plasmen in Spiegelkonfigurationen ist Gegenstand zahlreicher fusionsorientierter experimenteller und theoretischer Untersuchungen, beispielsweise des Elmo-Bumpy-Torus-Teams (s. u. a. Dandl et al. 1975, Uckan & EBT-Arbeitsgruppe 1983, Van Dam 1983). Eine genaue Identifizierung der in unserem Experiment wirksamen Instabilität steht bisher aus.

4.2 MESSBEDINGUNGEN

Durch spektroskopische Messungen an Argon- und Kupferlinien sollte die Korrelation zwischen dem Kupfergehalt der Entladung und der Intensität hochangeregter Argon-Zustände vermessen und interpretiert werden. Die Umrechnung von gemessenen Zählraten $\tilde{\Phi}_{j0}$ in Besetzungsdichten n_z^j atomarer Zustände j ist durch folgende Beziehung gegeben:

$$n_z^j A_{j0} = \frac{\tilde{\Phi}_{j0}}{\frac{\Delta\Omega}{4\pi} \Delta V \varepsilon(\lambda_0)} \quad (106)$$

$n_z^j A_{j0}$ ist die Gesamtanzahl von Photonen der Energie $h\nu_{0j}$ (Wellenlänge λ_0), die in der Zeit dt aus dem Plasmateilvolumen ΔV isotrop in den Raumwinkel 4π emittiert wird. Da der mittlere Raumwinkel $\Delta\Omega$, unter dem das Plasma beobachtet wird, und die Ansprechwahrscheinlichkeit $\varepsilon(\lambda_0)$ des Spektrometers bekannt sind, ist die Umrechnung der Zählrate $\tilde{\Phi}_{j0}$ auf die Besetzungsdichte n_z^j möglich.

Die Verwendung des absolut kalibrierten Meßaufbaus mit Photomultiplier und Channeltron hat zur Folge, daß Linienintensitäten in verschiedenen Wellenlängenbereichen nicht simultan registriert werden können. Es müssen aber bei allen spektroskopischen Messungen, die zur Bestimmung des Umladungs-Ratenkoeffizienten benutzt werden, identische Plasmabedingungen vorliegen. Linienintensitätsmessungen sowohl im VUV- als auch im UV-Bereich bei gleichem Neutralgasdruck und gleicher eingespeister Mikrowellenleistung zeigen jedoch, daß sich die Linienintensitäten erst 30 - 50 min nach der erfolgten Plasmazündung asymptotisch einem konstanten Wert annähern. Die mittlere reflektierte Mikrowellenleistung P_{ref} wird in dieser Zeit kleiner, was bei konstanter eingespeister Mikrowellenleistung eine Verbesserung der Einkopplung bedeutet, und nähert sich ebenfalls nach dieser Zeit einem Mittelwert.

Nachdem sich stabile Plasmaverhältnisse eingestellt haben, können die ersten auswertbaren Messungen durchgeführt werden. Spektroskopische Messungen an der EZR-Entladung sind also nur vergleichbar, wenn sie bei gleichem Neutralgasdruck p , gleicher eingekoppelter Mikrowellenleistung P_{in} und gleicher reflektierter Mikrowellenleistung P_{ref} durchgeführt werden.

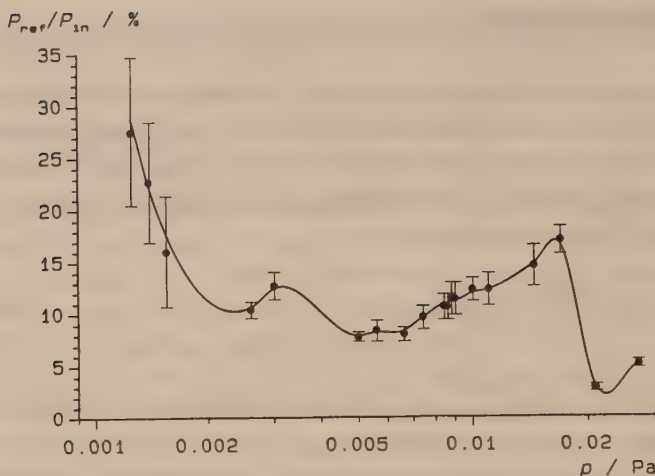


Abb. 18: Mikrowellen-Einkopplungsgüte P_{ref}/P_{in}
in Abhängigkeit vom Neutralgasdruck p

Die charakteristische Abhängigkeit der Einkopplungsgüte P_{ref}/P_{in} vom Druck p ist in Abb. 18 dargestellt. Bei Neutralgasdrücken um 10^{-3} Pa erreicht die Elektronendichte n_e gerade die Zünddichte, bei der das Plasma existieren kann. Zwischen $3 \cdot 10^{-3}$ Pa und $1 \cdot 10^{-4}$ Pa scheint der druckabhängige Verlauf der reflektierten Leistung mit dem Verlauf der gemessenen Elektronendichte n_e (s. Abb. 22) zu korrelieren. Allerdings ist der Meßfehler der Elektronendichte zu groß und der Druckbereich, in dem n_e bestimmt wurde, zu klein, um eine strenge Korrelation zwischen der reflektierten Mikrowellenleistung und der Elektronendichte nachweisen zu können.

Eine mögliche Erklärung für das druckabhängige Verhalten der reflektierten Leistung ergibt sich aus dem Ausbreitungsverhalten der TE_{10} - Mikrowelle (Frequenz ω), die als sog. außerordentliche Welle ins Plasma eingekoppelt wird. Dieser Wellentyp kann sich in Gebieten des Plasmas, in denen Gleichung (107) gilt, nicht ausbreiten.

$$\left(\omega_p^2 + \omega_c^2 \right)^{1/2} < \omega < \frac{1}{2} \left[\omega_c + \left(\omega_c^2 + 4 \omega_p^2 \right)^{1/2} \right]. \quad (107)$$

Dabei ist die Elektronenzyklotronfrequenz

$$\omega_c = \frac{e B}{m_e} \quad (108)$$

an einem festen Ort im Plasma bei zeitlich konstantem Magnetfeld B unabhängig von der Elektronendichte. Die Plasmafrequenz

$$\omega_p = \left[\frac{n_e e^2}{\epsilon_0 m_e} \right]^{1/2} \quad (109)$$

und damit auch die Grenzen des Frequenzbereiches aus Gleichung (107) sind jedoch direkt abhängig von n_e . Somit existieren wahrscheinlich bei größerer Elektronendichte mehr und bei kleineren Elektronendichten weniger Orte im Plasma, an denen sich die außerordentliche Welle nicht ausbreiten kann und dort reflektiert wird. Man kann jedoch nicht unmittelbar folgern, daß bei denjenigen Neutralgasdrücken p , bei denen die mittlere reflektierte Leistung besonders klein ist, die Stabilität des Plasmas auch entsprechend groß ist. Der Meßwert der reflektierten Leistung dient somit bei den spektroskopischen Messungen nur der Nachprüfbarkeit gleicher Plasmaverhältnisse.

4.3 MESSUNGEN VON ArI-VUV- UND CuI-VUV- RESONANZLINIEN-INTENSITÄTEN

Die spektroskopischen Messungen wurden zuerst bei festen Neutralgasdrücken und konstanter Mikrowellenleistung $P_{in} = 2$ kW an einer Dauerstrich-EZR-Entladung vorgenommen. Um die zeitliche Entwicklung der Linienintensitäten zu betrachten, wurden bei denselben Neutralgasdrücken und einer Puls-Mikrowellenleistung von 2 kW die Entladung mit einer Tastrate von 1 : 1 gepulst betrieben.

Mittelt man über alle Pulszeiten, in denen das Plasma existiert, und vergleicht die so errechnete Zählrate mit der mittleren Zählrate, die im Dauerstrichbetrieb der Entladung gemessen wurde, kommt man zu folgendem Schluß: Bei gepulster Entladung ergibt sich in etwa die gleiche Druckabhängigkeit der Linienintensitäten wie bei den Messungen an der EZR- Dauerstrichentladung, wie man auf Abb. 19 am Beispiel der CuI-Resonanzlinie bei 324.75 nm sehen kann.

Die mittleren Zählraten bei Dauerstrichentladung liegen im Druckbereich unterhalb $7 \cdot 10^{-3}$ Pa maximal 8 % über den Zählraten bei gepulster Entladung. Dieses Ergebnis ist dann zu erwarten, wenn die Zeitspanne, in der sich eine Instabilität entwickelt, kurz gegen die Pulsdauer ist. Dies ist hier der Fall, da die Pulslänge 60 ms und die Elektroneneinschlußzeit 0.2 ms beträgt (Marlinghaus 1985); bei instabilen Bedingungen – also im Druckbereich unterhalb $7 \cdot 10^{-3}$ Pa – kann die Einschlußzeit sicherlich eher als noch kürzer angenommen werden.

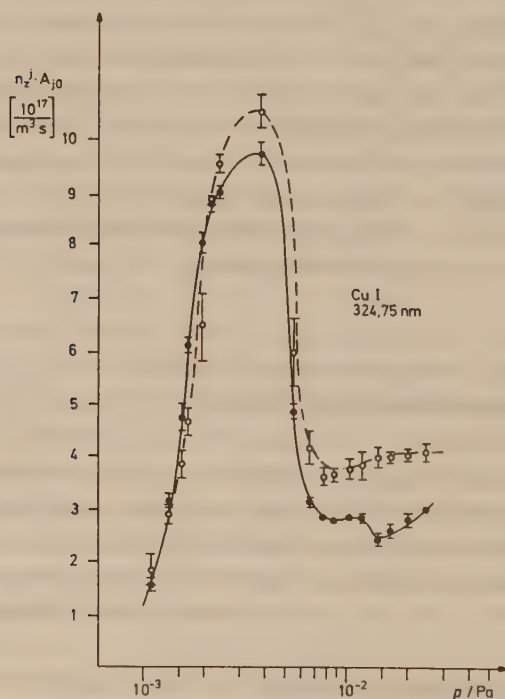


Abb. 19: Druckabhängigkeit der Intensität der Cu I-Resonanzlinie 324.75 nm bei gepulster Entladung (2 kW, Tastrate 1:1) (●) und bei Dauerstrichentladung (2 kW cw) (○)

Linien-
intensität / rel. Einh.

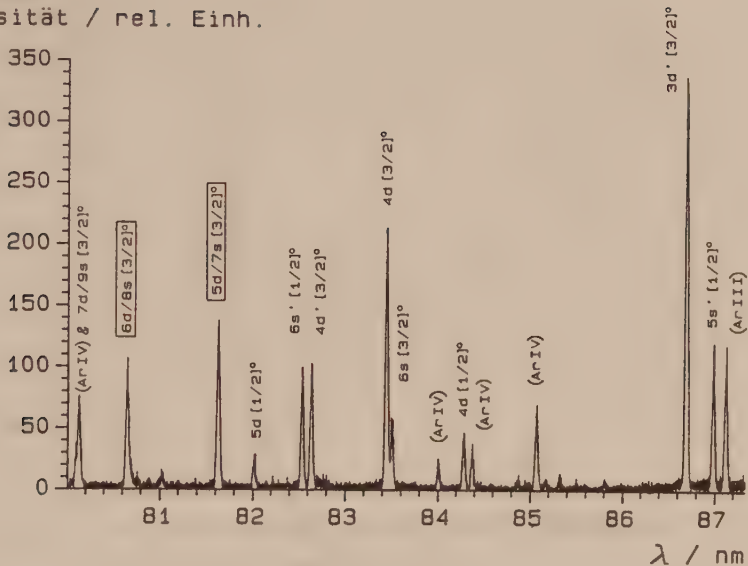


Abb. 20: VUV-Spektrum der EZR-Entladung zwischen 80 nm und 87 nm:
ArI-Übergänge aus den Zuständen $n\text{I} [\text{K}]^{\circ}$ in den Grundzustand

Theoretische Überlegungen (s. Abschnitt 2.1.4) hatten gezeigt, daß in erster Linie hochangeregte $\text{Ar}^*(ns)$ ($n > 7$) und $\text{Ar}^*(md)$ ($m > 5$) Niveaus durch einen Zweielektronentransfer $\text{Ar}^{2+} + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^* + \text{Cu}^{2+}$ bevölkert werden können. Im Spektrum gut sichtbar sind die Resonanzlinien bei 80.64711 nm ($6d [3/2]^{\circ}$), 80.68689 nm ($8s [3/2]^{\circ}$), 81.6232 nm ($5d [3/2]^{\circ}$) und 81.6464 nm ($7s [3/2]^{\circ}$), wie man in Abb. 20 sieht. Die letzten beiden Linien sind nicht mehr trennbar, da die Auflösungsgrenze des Spektrometers bei 0.03 nm liegt. Aus demselben Grund ist das Linienpaar 80.13577/80.13937 nm, das aus den Übergängen von $7d [3/2]^{\circ}$ und $9s [3/2]^{\circ}$ in den Grundzustand entsteht, von einer benachbarten ArIV-Linie bei 80.141 nm nicht zu trennen. Das gleiche Problem ergibt sich auch für die ArI-Spektrallinien bei 79.7595 nm ($8d [3/2]^{\circ}$) und 79.78818 nm ($9s [3/2]^{\circ}$) und die CuII-Linie bei 79.7455 nm. Aus diesen Gründen muß sich die spektroskopische Untersuchung eines Zweielektronentransfers auf die Resonanzübergänge der Zustände $5d [3/2]^{\circ}$, $7s [3/2]^{\circ}$ sowie $6d [3/2]^{\circ}$ und $8s [3/2]^{\circ}$ in den Grundzustand beschränken.

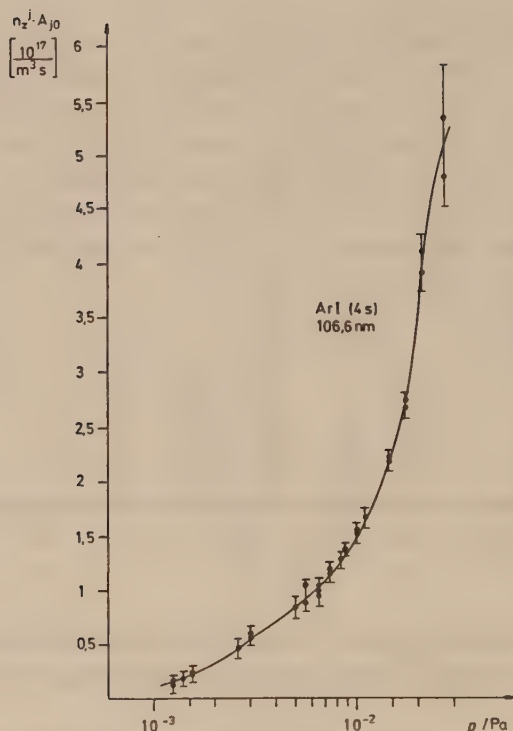


Abb. 21: Druckabhängigkeit der Intensität der ArI-Resonanzlinie 106.6 nm bei gepulster Entladung (2 kW, Tastrate 1:1)

Zur späteren Berechnung des Elektronentransfer-Wirkungsquerschnitts muß die Besetzungsdichte n_{ArI}^0 des Grundzustandes des neutralen Argons in der Entladung bekannt sein. Diese kann aus der Elektronendichte n_e , der Linienintensität der Resonanzlinie bei 106.6 nm und dem Elektronenstoßanregungs-Ratenkoeffizienten $\langle 0, j_1 \rangle$ gemäß Gleichung (105) aus Abschnitt 2.2.4 berechnet werden. Die spektroskopischen Messungen (s. Abb. 21) zeigen, daß die Intensität dieser VUV-Spektrallinie mit wachsendem Neutralgasdruck ansteigt. Da der untere Zustand $4s[3/2]^0$ vorwiegend durch Elektronenstoßanregung aus dem ArI-Grundzustand besetzt wird, ist ein Anwachsen der Linienintensität bei Vergrößerung des Neutralgasdrucks auch zu erwarten.

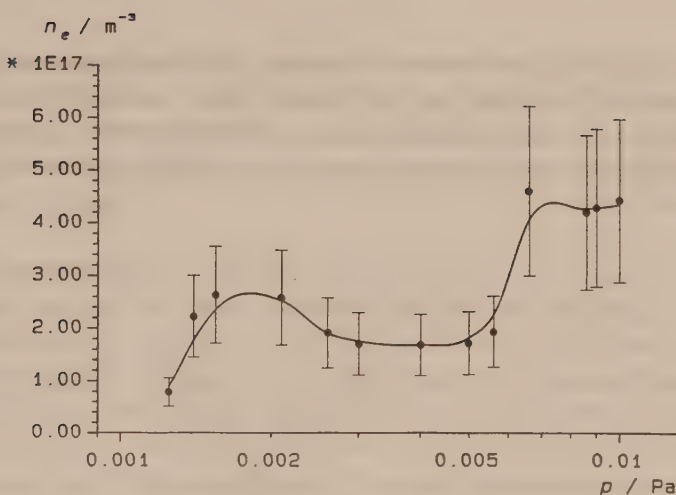


Abb. 22: Druckabhängigkeit der Elektronendichte bei Dauerstrichentladung (2 kW) (Marlinghaus 1985)

Die Elektronendichte dagegen besitzt eine völlig andere Druckabhängigkeit (s. Abb. 22): Sie steigt bis $p = 1.55 \cdot 10^{-3}$ Pa auf $2.64 \cdot 10^{17} m^{-3}$, fällt schließlich auf $1.7 \cdot 10^{17} m^{-3}$, um bei $6.6 \cdot 10^{-3}$ Pa auf $4.64 \cdot 10^{17} m^{-3}$ zu steigen. Sie wurde aus der Summe aller gemessenen Ionendichten (Marlinghaus 1985) unter der Annahme eines quasineutralen Plasmas berechnet. Die Spektrallinien der Ionen und daraus resultierend die Ionendichten selber zeigen jedoch das oben beschriebene, davon abweichende Druckverhalten (Marlinghaus 1985).

Die Intensitätsmessung der CuI-Spektrallinie bei 324.75 nm (Abb. 19) liefert eine Erklärung für dieses Verhalten: In demjenigen Druckbereich, in dem die CuI-Linienintensität und damit die Kupferdichte in der EZR-Entladung groß ist, sinken die Ionendichten ab. Bei diesen Neutralgasdrücken liegt ein instabiles Plasma vor, das zur Kupferresonatorwand driftet und dort Wandmaterial zerstäubt. Aus der Linienintensität der CuI-Linie schließlich läßt sich gemäß Gleichung (103) die Dichte des CuI-Grundzustands ermitteln, die für die Wirkungsquerschnittsrechnung benötigt wird.

Es sollen nun die spektroskopischen Messungen der Resonanzübergänge der Zustände $5d [3/2]^0$, $7s [3/2]^0$, $6d [3/2]^0$ und $8s [3/2]^0$ in den Grundzustand betrachtet werden. Diese Zustände liegen in dem theoretisch berechneten Reaktionsfenster für einen Zweielektronentransfer $\text{Ar}^{2+} + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^* (nl) + \text{Cu}^{2+}$ (s. Abschnitt 2.1.4).

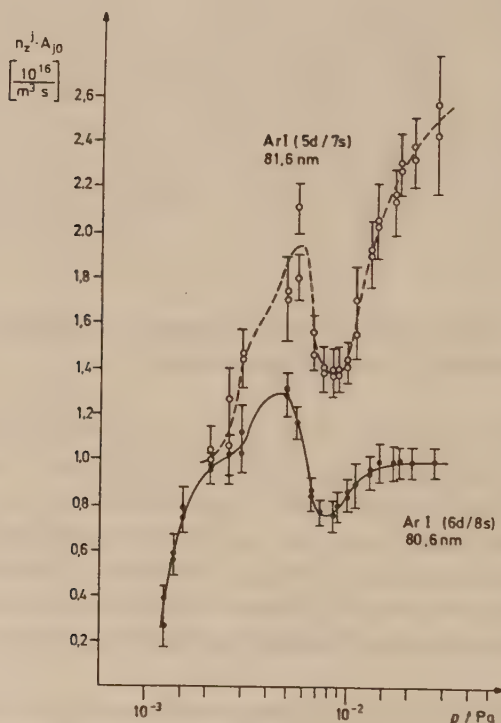


Abb. 23: Druckabhängigkeit der Intensität der Ar I-Resonanzlinienpaare 81.6 nm (○) und 80.6 nm (●) bei gepulster Entladung (2 kW)

Die Intensität der Linie bei 81.6 nm (aus $5d$ und $7s [3/2]^0$) zeigt ein ähnliches Verhalten wie die Cu I-Linie: Sie erreicht bei $6 \cdot 10^{-3} \text{ Pa}$ ein erstes Maximum, fällt dann steil ab, steigt allerdings für Drücke über 10^{-2} Pa erneut an, wie in Abb. 23 zu sehen ist.

Die Korrelation zwischen der Linie bei 80.6 nm (aus $6d$ und $8s[3/2]^o$) und der CuI-Linie scheint sogar noch stärker zu sein: Das erste Maximum beider Linienintensitäten wird bei $5 \cdot 10^{-3}$ Pa erreicht; außerdem bleibt die Linienintensität und damit die Zustandsdichte der Zustände $6d$ und $8s$ bei Drücken über 10^{-2} Pa nahezu konstant.

Die obigen Messungen wurden mit derjenigen Monochromatoreinstellung durchgeführt, mit der der gesamte Meßaufbau absolut kalibriert worden war. Die Übergänge aus $5d[3/2]^o$, $7s[3/2]^o$, $6d[3/2]^o$ und $8s[3/2]^o$ sind bei dieser Einstellung nicht trennbar, so daß sich die genannten Messungen jeweils auf Linienpaare beziehen. Da die relativen Intensitäten in der Literatur (Kelly 1982) mit 120:70 bzw. 100:60 für diese beiden Linienpaare angegeben sind, ist zu erwarten, daß die Übergänge aus den d-Zuständen zumindest bei stabilen Plasmabedingungen die größere Komponente der beiden Linienpaare bilden.

Um die Korrelationen zwischen der Besetzung hochangeregter Argonzustände und dem Kupfergehalt der EZR-Entladung noch genauer zu untersuchen, wurde am gepulsten Plasma das zeitliche Verhalten der ArI- und der CuI-Linien bei charakteristischen Neutralgasdrücken näher betrachtet.

1.) Bei einem Druck von $2.5 \cdot 10^{-3}$ Pa befinden wir uns auf der ansteigenden Flanke der $\tilde{\phi}_{j0}(p)$ -Kurve. Die Intensität der Linien bei 106.6 nm sowie bei 81.6 nm scheint exponentiell abzufallen (Abb. 24). Da der Zustand $4s[3/2]^o$ in erster Linie durch Elektronenstoßanregung bevölkert wird, weist die Ähnlichkeit mit dem zeitlichen Verhalten der Linie bei 81.6 nm ebenfalls auf eine Besetzung der Zustände $5d/7s$ durch Elektronenstoßanregung hin. Der zeitliche Intensitätsverlauf der Linie bei 80.6 nm dagegen ähnelt stark dem Verlauf der CuI-Linienintensität; man erkennt in beiden Fällen deutlich ein 1. Maximum am Pulsanfang und ein 2. Maximum zwischen 2 und 13 ms.

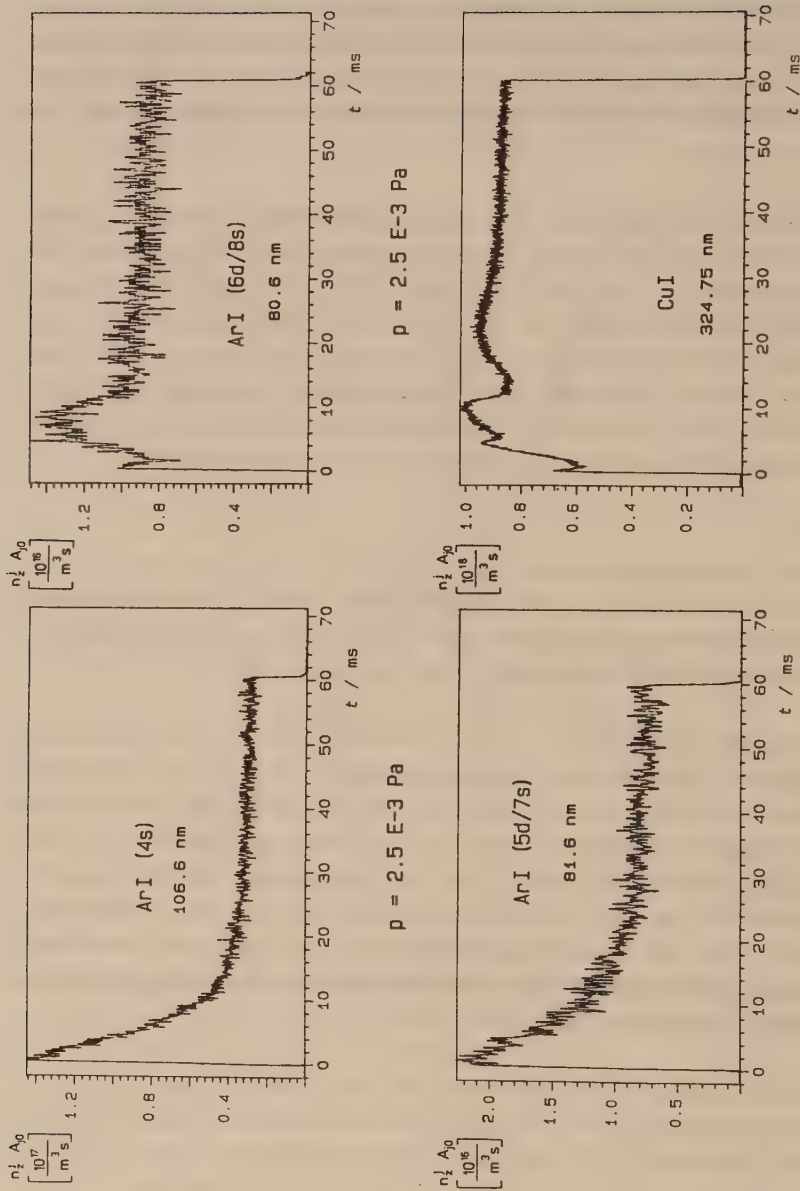


Abb. 24: Zeitliche Entwicklung von ArI- und CuI-Linienintensitäten bei gepulster Entladung ($p = 2.5 \cdot 10^{-3} \text{ Pa}$)

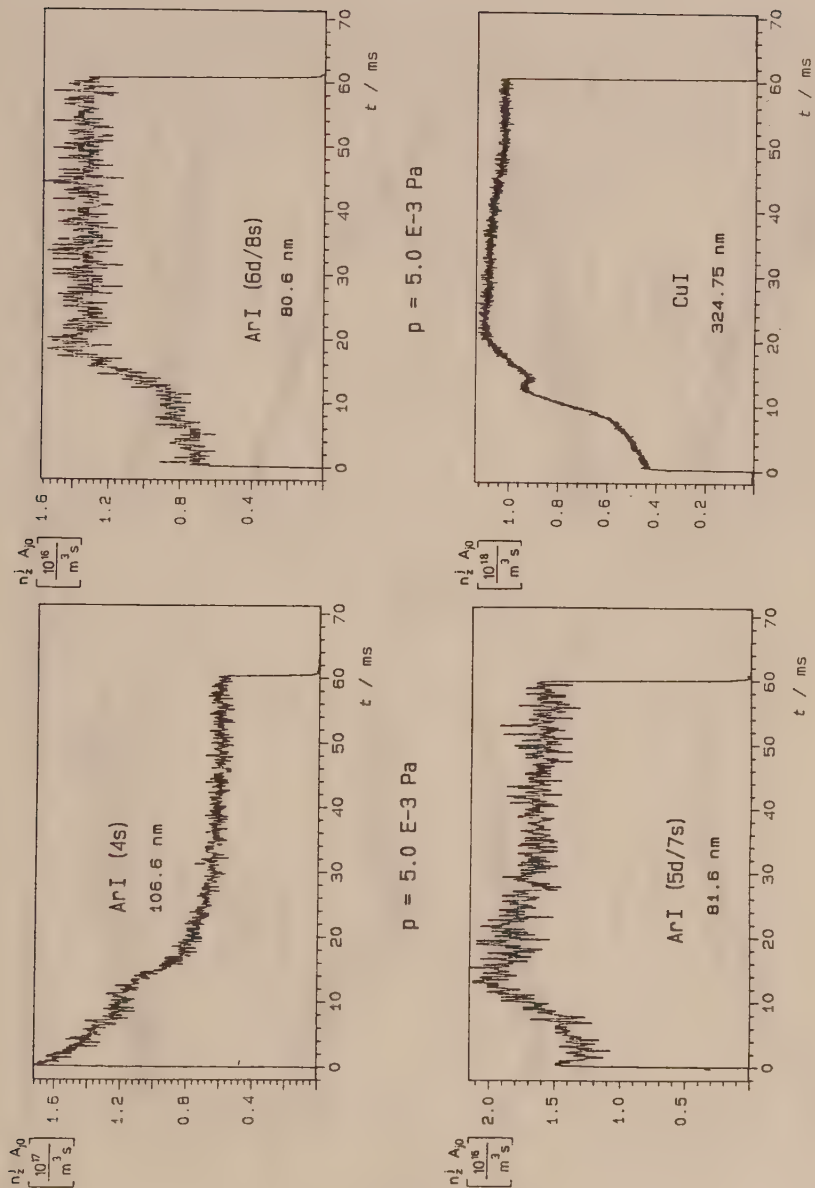
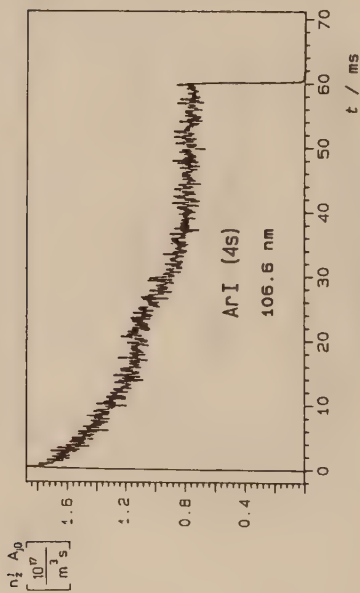
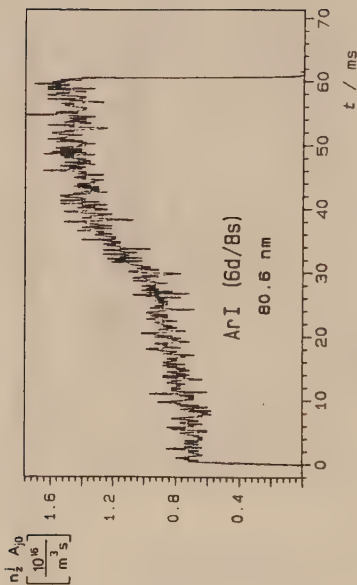


Abb. 25 : Zeitliche Entwicklung von ArI- und CuI-Linienintensitäten bei gepulster Entladung ($p = 5 \cdot 10^{-3} \text{ Pa}$)



$p = 5.6 \text{ E-3 Pa}$



$p = 5.6 \text{ E-3 Pa}$

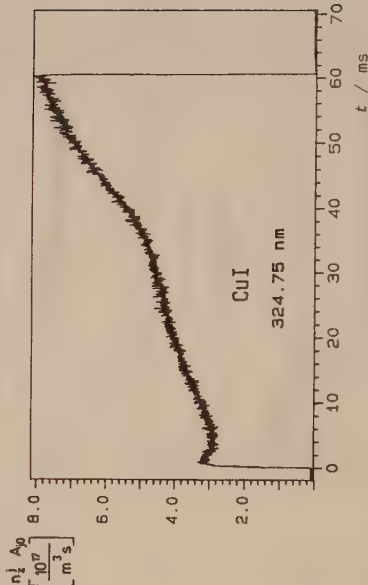
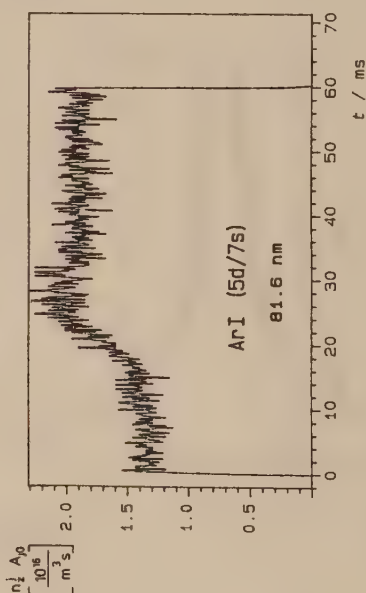


Abb. 26 : Zeitliche Entwicklung von ArI- und CuI-Linienintensitäten bei gepulster Entladung ($p = 5.6 \cdot 10^{-3} \text{ Pa}$)

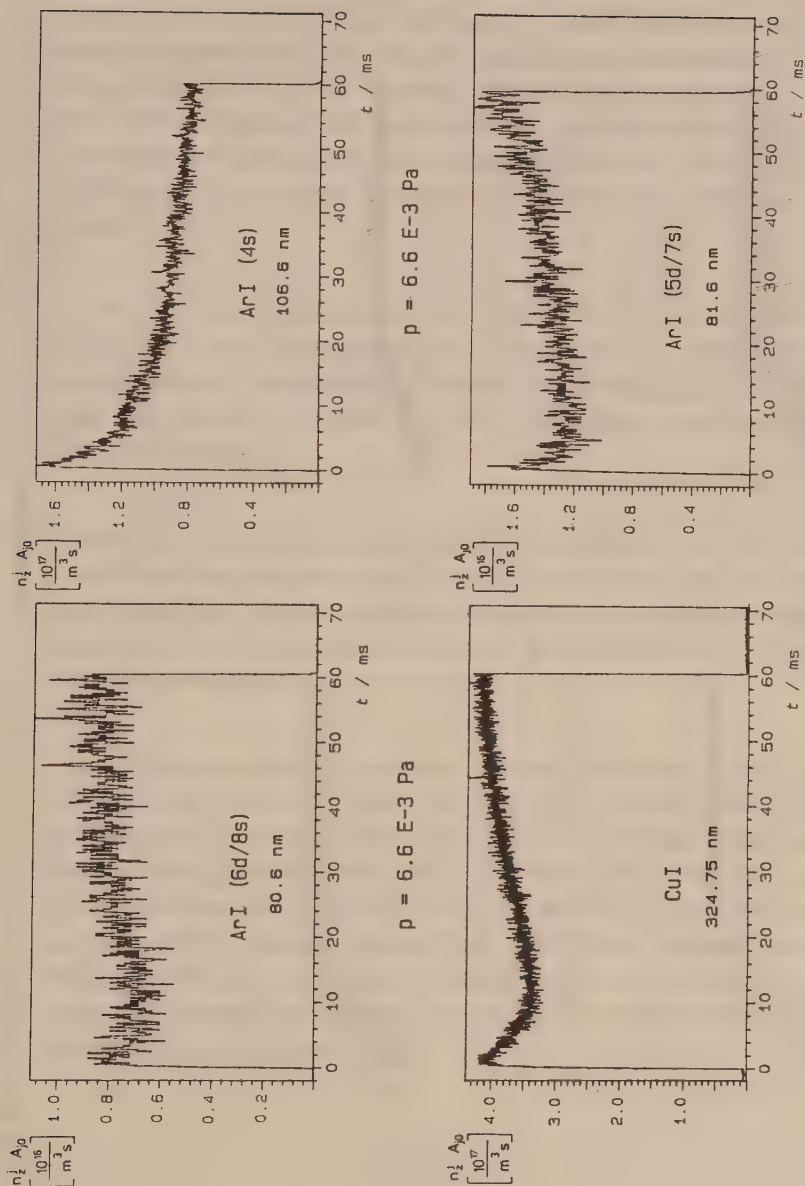
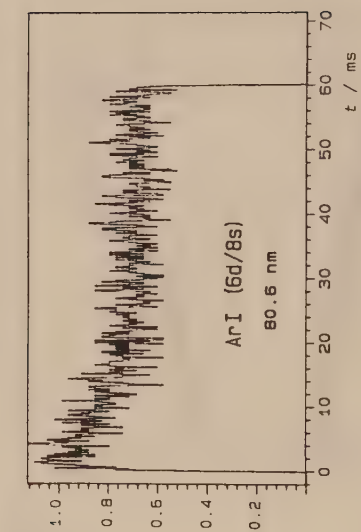
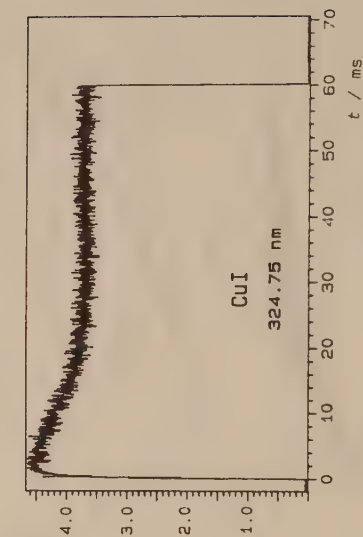


Abb. 27 : Zeitliche Entwicklung von ArI- und CuI-Linienintensitäten bei gepulster Entladung ($p = 6.6 \cdot 10^{-3} \text{ Pa}$)



$p = 8.85 \text{ E-3 Pa}$



$p = 8.85 \text{ E-3 Pa}$

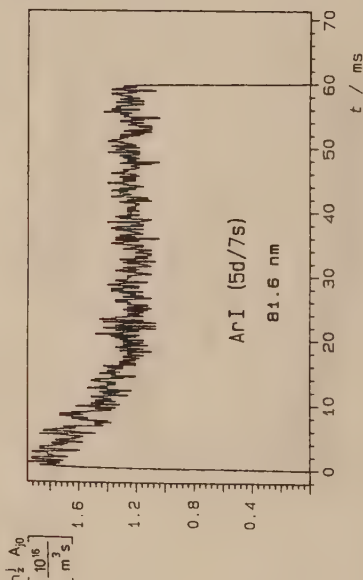
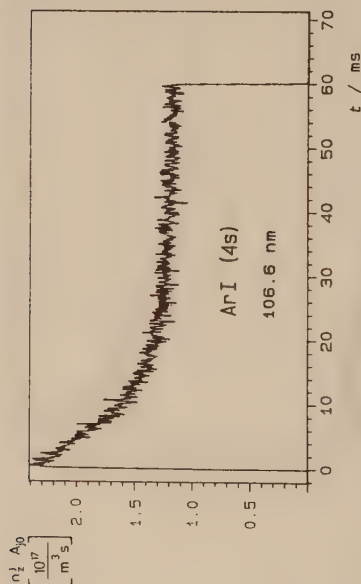


Abb. 28 : Zeitliche Entwicklung von ArI- und CuI-Linienintensitäten bei gepulster Entladung ($p = 8.85 \cdot 10^{-3} \text{ Pa}$)

2.) Sowohl die CuI- als auch die Intensitäten der Linie bei 80.6 nm und 81.6 nm sind bei einem Neutralgasdruck von $p = 5 \cdot 10^{-3}$ Pa maximal. Bei diesem Druck erkennt man in der zeitlichen Auflösung der CuI-Linienintensität ein erstes scharfes Maximum bei 13 ms, das mit einem Intensitätsmaximum der Linie bei 81.6 nm zusammenfällt, und ein zweites Maximum bei ungefähr 20 ms, das mit einem Intensitätsmaximum der Linie bei 80.6 nm korreliert (Abb. 25). Möglicherweise spiegelt sich hier wider, daß in diesem Druckbereich sowohl die Zustände 5d/7s als auch 6d/8s durch Umladungsprozesse vom neutralen Kupfer besetzt werden.

3.) Für einen etwas höheren Druck ($p = 5.6 \cdot 10^{-3}$ Pa) wird erneut die starke Korrelation der ArI-Linienintensität bei 80.6 nm mit der CuI-Linienintensität deutlich (Abb. 26). Die Intensität der Linie bei 81.6 nm dagegen erreicht ihr Maximum nach ca. 23 ms, während die Intensitäten der beiden anderen Linien ab 30 ms immer noch ansteigen.

4.) Bei einem Neutralgasdruck von $6.6 \cdot 10^{-3}$ Pa haben die Intensitäten der ArI-Linien bei 80.6 nm, 81.6 nm und der CuI-Linie ein Minimum (Abb. 27). Alle drei Linien zeigen eine ähnliche zeitliche Entwicklung, die sich deutlich von der der Linie bei 106.6 nm unterscheidet. Auch für diesen Druckmeßwert scheint der Zweielektronentransfer also noch eine Rolle zu spielen.

5.) Die Plasmainstabilität, die sich durch intensive Kupferspektrallinien indirekt nachweisen läßt, kann bei Drücken um $8.85 \cdot 10^{-3}$ Pa nicht mehr beobachtet werden. Der zeitliche Verlauf der jetzt schwachen CuI-Linienintensität und der ArI-Linienintensitäten bei 80.6 nm und 81.6 nm ähnelt jetzt stärker der Intensität der Linie bei 106.6 nm (Abb. 28). In diesem Druckbereich und für höhere Drücke geschieht die Besetzung der Zustände damit wahrscheinlich in erster Linie durch Elektronenstoßanregung aus dem Grundzustand und durch Kaskaden aus höherliegenden Zuständen, die ebenfalls durch Elektronenstoßanregung aus dem Grundzustand bevölkert werden.

Die zeitaufgelösten spektroskopischen Messungen zeigen also, daß die Korrelation zwischen der CuI-Linie und dem Linienpaar bei 80.6 nm für den Druckbereich zwischen $2 \cdot 10^{-3}$ Pa und $8.85 \cdot 10^{-3}$ Pa sehr stark ist, während eine Korrelation der Kupferdichte mit dem Linienpaar bei 81.6 nm nur in einem engen Druckbereich um $5 \cdot 10^{-3}$ Pa zu beobachten ist.

Die enge Korrelation des Linienpaars bei 80.6 nm, das durch Übergänge aus den ArI-Zuständen $6d \left[\frac{3}{2} \right]^o$ und $8s \left[\frac{3}{2} \right]^o$ in den Grundzustand entsteht, mit der Cu-Dichte in der Entladung läßt sich als Folge eines Zweielektronentransfers mit Hilfe des ECB-Modells erklären (s. Kapitel 2.1). Danach ist der Wirkungsquerschnitt für diesen Transferprozess maximal für Reaktionen mit kleinen Energiedefekten $Q \approx 0$, was für die Prozesse $\text{Ar}^{2+} + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^* (6d) + \text{Cu}^{2+}$ mit $Q = 0.001$ eV und $\text{Ar}^{2+} + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^* (8s) + \text{Cu}^{2+}$ mit $Q = 0.009$ eV ja erfüllt ist.

Um weiter zu klären, ob in erster Linie der 6d- oder der 8s-Zustand durch den Zweielektronentransfer besetzt werden, wurden spektroskopische Messungen bei einer Eintrittsspaltbreite von 10 μm durchgeführt. Bei dieser Einstellung gelingt bei langen Meßzeiten gerade die Auflösung der beiden VUV-Linien, die aus dem Übergang der Zustände $6d \left[\frac{3}{2} \right]^o$ (80.64711 nm) und $8s \left[\frac{3}{2} \right]^o$ (80.68689 nm) in den Grundzustand herrühren.

Bei Betrachtung dieser Meßergebnisse (s. Abb. 29 und Abb. 30) erkennt man als erstes, daß sowohl die Intensität der ArI-Linie bei 80.65 nm als auch die der ArI-Linie bei 80.69 nm die gleiche Druckabhängigkeit wie die CuI-Linienintensität besitzen. In dem Druckbereich, in dem das Plasma instabil brennt, ist jedoch die Linienintensität bei 80.65 nm zwischen 6- und 7.6-mal so groß wie die Linienintensität bei 80.69 nm. In dem Druckbereich oberhalb $8 \cdot 10^{-3}$ Pa, wo man von einem stabilen Plasma ausgehen kann, liegt dieser Faktor bei 4.5; dies ist aber immer noch deutlich höher als der in der Literatur angegebene Wert von 1.66 (Kelly 1982). Durch den Zweielektronentransfer wird also offensichtlich in erster Linie der $6d \left[\frac{3}{2} \right]^o$ -Zustand selektiv besetzt.

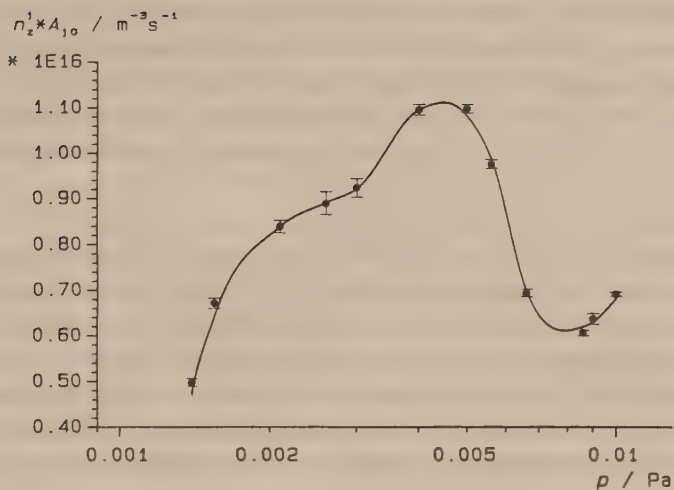


Abb. 29: Druckabhängigkeit der Intensität der ArI-Resonanzlinie
80.64711 nm (aus $6d[3/2]^o$) bei Dauerstrichentladung (2 kW)

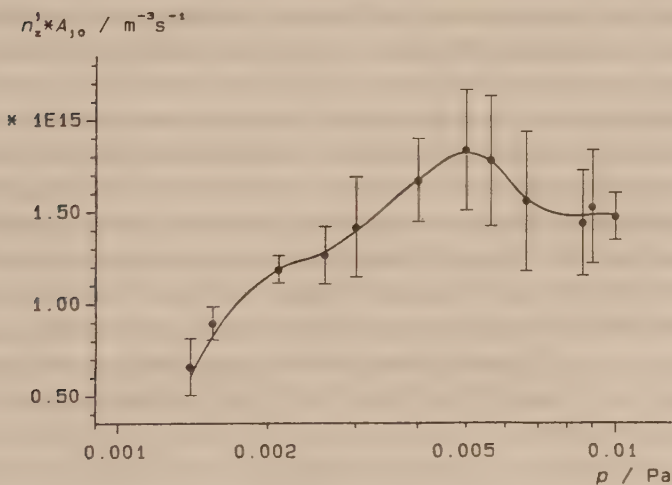


Abb. 30: Druckabhängigkeit der Intensität der ArI-Resonanzlinie
80.68689 nm (aus $8s[3/2]^o$) bei Dauerstrichentladung (2 kW)

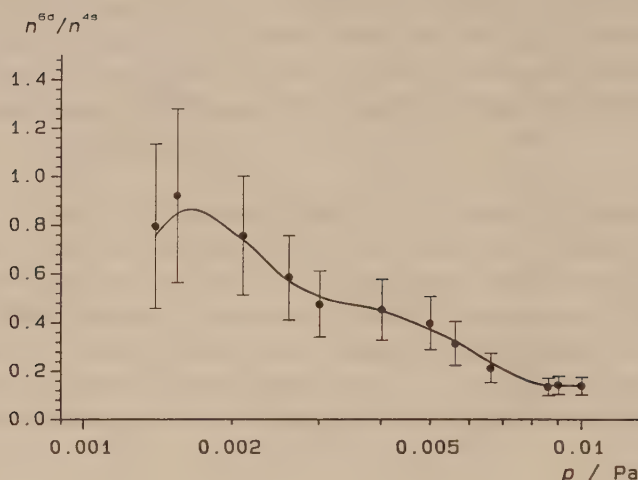


Abb. 31: Verhältnis der Besetzungsdichten n^{6d} / n^{4s}
der ArI-Zustände $6d[3/2]^o$ zu $4s[3/2]^o$

Bei selektiven Besetzungen von atomaren Zuständen, wie sie in diesem Fall für mehrere Zustände offensichtlich vorliegt, stellt sich zwangsläufig die Frage, ob diese Niveaus durch den Zweielektronentransfer überbesetzt werden oder nicht. Die Folge dieser Überbesetzung wäre u. U. ein laserfähiges System. Vergleicht man beispielsweise die Besetzung des $6d$ -Zustandes mit der des viel tiefer liegenden $4s$ -Zustandes, erkennt man, daß zwischen $1.5 \cdot 10^{-3}$ Pa und $2 \cdot 10^{-3}$ Pa beide Niveaus fast gleich stark besetzt sind (Abb. 31); ein optischer Übergang von dem einen Zustand in den anderen ist jedoch nicht erlaubt.

Eine Überbesetzung der beiden hochangeregten Zustandspaare gegenüber dem Argon-Grundzustand liegt im EZR-Plasma sicherlich nicht vor, da $n^{6d/8s} / n^0 < 4.88 \cdot 10^{-5}$ und $n^{5d/7s} / n^0 < 2.64 \cdot 10^{-5}$ gilt. Übergänge aus diesen hochangeregten Zuständen in andere tieferliegende Niveaus liegen bei $\lambda > 500$ nm und damit außerhalb des Wellenlängenbereichs, in dem das gesamte Meßsystem absolut kalibriert ist. Die entsprechenden Übergangswahrscheinlichkeiten sind zudem mindestens um den Faktor 100 kleiner als typische Resonanzübergangs-Wahrscheinlichkeiten.

Die Überbesetzung der hochangeregten ArI-Niveaus gegenüber dem Grundzustand und damit die Grundlage für einen Laser im VUV-Bereich wäre praktisch nur in einem experimentellen Aufbau realisierbar, in dem Ar^{2+} -Ionen auf ein Cu-Target geschossen werden und die Besetzung des ArI-Grundzustandes nur durch Übergänge aus höheren Zuständen erfolgen kann.

Als weitere Frage ist zu klären, warum das zeitliche Verhalten der 81.6 nm-Linienintensität so stark von der der 80.6 nm-Linienintensität abweicht. Die entsprechenden Zustände $5d \left[\frac{3}{2} \right]^o$ und $6d \left[\frac{3}{2} \right]^o$ liegen nur um 0.18 eV auseinander, so daß der theoretische Wirkungsquerschnitt eines Zweielektronentransfers in diese Zustände (nach dem ECB-Modell) für Stoßenergien > 1 eV für beide Fälle ungefähr gleich groß ist (s. Abschnitt 2.1.4). Nur für unrealistisch kleine Stoßenergien (< 1 eV) ist die theoretische Energiebreite des Reaktionsfensters so schmal, daß der Wirkungsquerschnitt für den Transferprozeß zum 6d-Zustand wesentlich größer wird als derjenige für den Transfer zum 5d-Zustand.

Eine mögliche Erklärung für das unterschiedliche zeitliche Verhalten beider Resonanzlinienintensitäten wären Umladungsprozesse von Argon-Ionen mit anderen Verunreinigungsionen; allerdings konnten in den Spektren außer CuI- und CuII-Spektrallinien keine weiteren starken Verunreinigungslinien gefunden werden.

Eine andere mögliche Ursache könnte sein, daß die Messungen der verschiedenen Linienintensitäten nicht simultan, sondern bedingt durch den kalibrierten Meßaufbau nacheinander vorgenommen werden mußten. Als Maß für vergleichbare Plasmaverhältnisse wurden dabei zeitlich gemittelte Werte des Neutralgasdrucks und der reflektierten Leistung verwendet (s. Abschnitt 4.2). Die Meßergebnisse erwiesen sich jedoch auch in ihrer zeitlichen Auflösung als reproduzierbar. Zur Klärung dieser offenen Frage könnten möglicherweise simultane Messungen beider ArI-Resonanzlinien mit einem OMA-Meßsystem beitragen.

4.4 BESTIMMUNG DES RATENKOEFFIZIENTEN EINES ZWEIELEKTRONENTRANSFERS ZWISCHEN CuI UND ArIII

Ausgehend von den Ergebnissen der spektroskopischen Messungen sollten Ratenkoeffizienten für den beobachteten Zweielektronentransfer bestimmt werden. Dazu wurde zusammen mit Klawonn das Rechenprogrammpaket ELTRANS entwickelt. Mit Hilfe dieses Programmpaketes können Ratenkoeffizienten für die Elektronenstoßanregung und für den Zweielektronentransfer aus gemessenen Plasmadaten und tabellierten atomaren Daten berechnet werden.

Als Plasmadaten gehen dabei die Intensitäten der ArI- und CuI-Resonanzlinien, die wegen des absolut kalibrierten Meßaufbaus direkt in Besetzungsdichten der entsprechenden Zustände umgerechnet werden können, sowie Ionendichten und Elektronendichten ein. Die ArIII-Ionendichte n_{ArIII} sowie die Elektronendichte n_e der Entladung konnten aus der Messung der Ladungszustandsverteilung (Marlinghaus 1985) entnommen werden. Unter den atomaren Daten werden Energiewerte E_i , E_j und statistische Gewichte g_i , g_j zweier Zustände sowie die Wahrscheinlichkeit A_{ji} für einen optischen Übergang zwischen diesen beiden Zuständen verstanden.

Für elektronenstoßinduzierte Übergänge zwischen diesen beiden Zuständen werden im Programm Wirkungsquerschnitte berechnet; für niedrige Stoßenergien wird dazu eine semiempirische Näherung von Regemorter und für hohe Energien die Bethe-Näherung verwendet (s. auch Abschnitt 2.2.3.2). Zur Berechnung der Elektronenstoßanregungs-Ratenkoeffizienten wird angenommen, daß die Elektronenenergie-Verteilungsfunktion $F(E)$ durch die Näherung $F(E) \sim E^{-s}$ beschrieben werden kann, wobei der Spektralindex s zwischen 1 und 2 liegt (s. Abschnitt 2.2.3.3). Die Ratenkoeffizienten werden für die betrachteten ArI- und CuI-Resonanzübergänge sowie für die Kaskadenübergänge aus energetisch höherliegenden Niveaus k für diejenigen Fälle berechnet, für die $A_{ki} / \sum A_{ki} > 10\%$ gilt. Somit müssen für die Besetzung des ArI $4s \left[\frac{3}{2} \right]^o$ -Zustandes und des CuI $4p$ -Zustandes jeweils 6 Kaskadenkorrekturterme berücksichtigt werden. Aus den gemessenen Zustandsbesetzungsdichten, Ionen- und Elektronendichten sowie den berechneten Elektronenstoßanregungs-Ratenkoeffizienten lassen sich schließlich nach Gleichung (104) aus Abschnitt 2.2.4 die Ratenkoeffizienten R_{trans} für einen Zweielektronentransfer ermitteln.

$$n_e^1 * A_{j,0} / \text{m}^{-3} \text{s}^{-1}$$

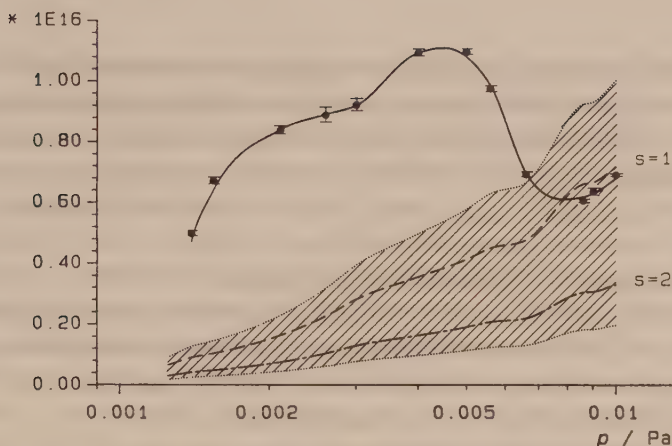


Abb. 32: Anteil der Elektronenstoßanregung aus dem Grundzustand auf die Besetzung des ArI-Zustandes $6d[3/2]^o$: Strahlungsübergangsterm $n^{6d} * A_{6d,0}$ (●) im Vergleich zum Elektronenstoßanregungsterm $n_e n_{\text{ArI}}^0 \langle \sigma_{0,6d} v_e \rangle$ (schraffiert) mit $F(E) \sim E^{-1}$ (---) und $F(E) \sim E^{-2}$ (- - -) (..... maximale obere bzw. untere Fehlergrenze)

$$n_e^1 * A_{j,0} / \text{m}^{-3} \text{s}^{-1}$$

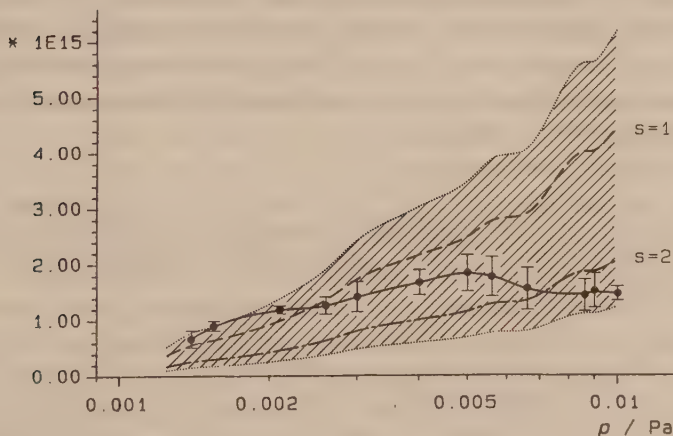


Abb. 33: Anteil der Elektronenstoßanregung aus dem Grundzustand auf die Besetzung des ArI-Zustandes $8s[3/2]^o$: $n^{8s} * A_{8s,0}$ (●) im Vergleich zu $n_e n_{\text{ArI}}^0 \langle \sigma_{0,8s} v_e \rangle$ (schraffiert)

Als erste Frage soll jedoch geklärt werden, welchen Anteil die Elektronenstoßanregung aus dem ArI-Grundzustand auf die Besetzung der hochangeregten Zustände $6d \left[\frac{3}{2} \right]^0$ und $8s \left[\frac{3}{2} \right]^0$ hat. Es zeigt sich dabei (s. Abb. 32), daß im Druckbereich zwischen $1.5 \cdot 10^{-3}$ Pa und $7 \cdot 10^{-3}$ Pa der Elektronenstoß-Anregungsterm $n_e n_{\text{ArI}}^0 \langle \sigma_{06d} v_e \rangle$ für $s = 1$ nur im Mittel 30 % und für $s = 2$ im Mittel 10 % zur Besetzung des Zustandes $6d$ beiträgt. Die Bevölkering dieses hochangeregten ArI-Niveaus erfolgt also in diesem Druckbereich in erster Linie durch andere Prozesse, wobei ein Zweielektronen-Transferprozeß am wahrscheinlichsten ist. Für höhere Neutralgasdrücke, bei denen die Instabilität des Plasmas nicht mehr erkennbar ist, wird das Niveau $6d \left[\frac{3}{2} \right]^0$ im Rahmen der Fehlergrenzen ausschließlich durch Elektronenstoßanregung besetzt.

Für die Betrachtung der Bevölkering des Zustand $8s \left[\frac{3}{2} \right]^0$ scheint die Abhängigkeit vom angenommenen Spektralindex s eine größere Rolle zu spielen als bei vorhergehender Betrachtung (Abb. 33). Für $s = 1$ wird der errechnete Elektronenstoß-Anregungsterm offensichtlich gerade für Drücke über $7 \cdot 10^{-3}$ Pa zu groß, für $s = 2$ trägt die Elektronenstoßanregung im Mittel zu über 50 % zur Zustandsbesetzung bei. Ein realistischer Spektralindexwert s läge also zwischen 1.5 und 2. Der Effekt, daß die Niveaubesetzung hauptsächlich durch Transferprozesse und nicht durch Elektronenstoßanregung erfolgt, ist demnach nur beim ArI $6d \left[\frac{3}{2} \right]^0$ -Niveau deutlich erkennbar. Die Untersuchung der Besetzung des Zustandes $8s$ zeigt, daß trotz scheinbarer Korrelation der Linie bei 80.69 nm mit der Kupferintensität der Anteil der Besetzung durch Elektronenstoß unbedingt berechnet werden muß, um eine Aussage bezüglich eines möglichen Transfermechanismus treffen zu können.

Die Berechnung des Ratenkoeffizienten R_{trans} für den Zweielektronen-Transferprozeß, der das Niveau $6d \left[\frac{3}{2} \right]^0$ selektiv besetzt, liefert schließlich folgende Ergebnisse:

- 1.) Für alle Rechnungen ergab sich, unabhängig von der Größe des Spektralindices und der Berücksichtigung von Kaskaden, ein formal negativer Ratenkoeffizient für Neutralgasdrücke unterhalb von $1.4 \cdot 10^{-3}$ Pa und oberhalb von $8 \cdot 10^{-3}$ Pa.

In diesen Druckbereichen ist die Kupferkonzentration im Plasma und damit die Wahrscheinlichkeit von Transferprozessen so klein, daß das in dieser Untersuchung entwickelte Modell zur Bestimmung von Transferratenkoeffizienten dort nicht mehr gültig ist. Die Betrachtung beschränkt sich also im folgenden auf den Druckbereich $1.4 \cdot 10^{-3} \text{ Pa} < p < 8 \cdot 10^{-3} \text{ Pa}$.

2.) Werden bei der Berechnung des Ratenkoeffizienten die Kaskaden, die zur zusätzlichen Bevölkerung des ArI 4s $[3/2]^o$ - und des CuI 4p-Zustandes führen, nicht berücksichtigt, ergeben sich schon für Drücke $p > 5 \cdot 10^{-3} \text{ Pa}$ formal negative Werte von R_{trans} (s. Abb. 34). Die Spektrallinie bei 80.6 nm hat jedoch gerade bei $5 \cdot 10^{-3} \text{ Pa}$ ein Intensitätsmaximum, so daß zumindest bei diesem Druck ein nichtverschwindender positiver Ratenkoeffizient für den Zweielektronentransfer zu erwarten wäre. Es zeigt sich schließlich, daß unter Berücksichtigung der Kaskaden der Ratenkoeffizient tatsächlich bis $7 \cdot 10^{-3} \text{ Pa}$ positiv bleibt (s. Abb. 35). Bei Aufstellung der Bilanzgleichungen für die beteiligten Argon- und Kupfer-Zustände ist also offensichtlich die genaue Berücksichtigung von Übergängen aus höheren Zuständen notwendig, um glaubhafte Werte für die Ratenkoeffizienten zu erhalten.

3.) Die Berechnungen von R_{trans} unter Berücksichtigung von Kaskadenkorrekturen zeigen, daß der Ratenkoeffizient im Druckbereich zwischen $1.4 \cdot 10^{-3} \text{ Pa}$ und $6 \cdot 10^{-3} \text{ Pa}$ kaum druckabhängig ist (s. Abb. 35). Seine Werte in diesem Druckbereich liegen zwischen $4.07 \cdot 10^{-15} \text{ m}^{-3} \text{ s}^{-1}$ und $4.23 \cdot 10^{-14} \text{ m}^{-3} \text{ s}^{-1}$ bei einem angenommenen Spektralindex $s = 1$, der Mittelwert liegt zwischen $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^{-3} \text{ s}^{-1}$ und $2 \cdot 10^{-14} \text{ m}^{-3} \text{ s}^{-1}$. Für $s = 2$ ergeben sich Werte zwischen $3.15 \cdot 10^{-15} \text{ m}^{-3} \text{ s}^{-1}$ und $4.32 \cdot 10^{-14} \text{ m}^{-3} \text{ s}^{-1}$, der Mittelwert ist erneut ungefähr zwischen $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^{-3} \text{ s}^{-1}$ und $2 \cdot 10^{-14} \text{ m}^{-3} \text{ s}^{-1}$ anzusiedeln. Der Ratenkoeffizient ist also in dem Druckbereich, in dem das Plasma instabil brennt, weder stark druckabhängig noch stark abhängig vom angenommenen Spektralindex s . Der relativ große Fehler bei der Bestimmung von R_{trans} ist in erster Linie auf die Ungenauigkeit atomarer Übergangswahrscheinlichkeiten zurückzuführen, die in die Berechnungen der Ionendichten und Elektronendichten aus Linienintensitäten und in die Berechnung von Elektronenstoßanregungs-Wirkungsquerschnitten eingeht (s. Kapitel 4.5).

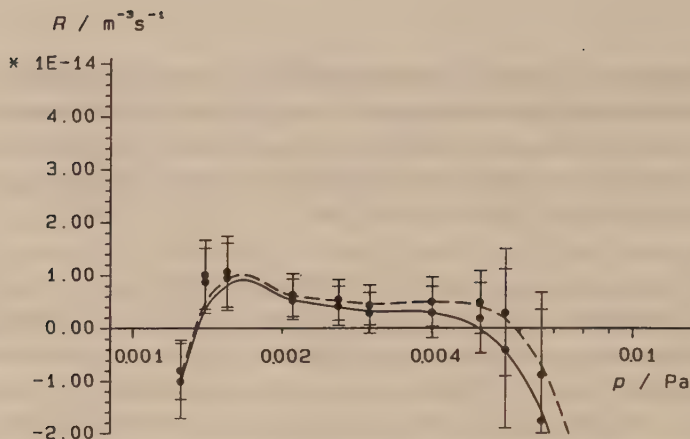


Abb. 34: Ratenkoeffizient für den Zweielektronentransfer
 $\text{Ar}^{2+} + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^*(6d) + \text{Cu}^{2+}$ ohne Berücksichtigung
 von Kaskadenkorrekturen
 (angenommener Spektralindex $s = 1$ (—) und $s = 2$ (---))

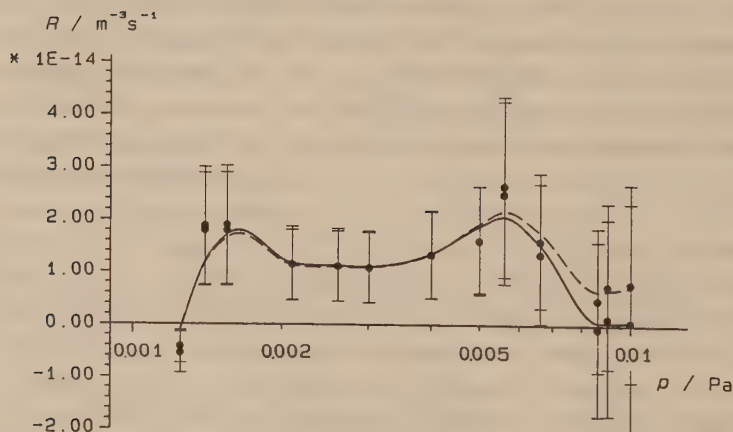


Abb. 35: Ratenkoeffizient für den Zweielektronentransfer
 $\text{Ar}^{2+} + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^*(6d) + \text{Cu}^{2+}$ unter Berücksichtigung
 von Kaskadenkorrekturen ($s = 1$ (—), $s = 2$ (---))

Bei der Abschätzung des Wirkungsquerschnitts dieser Reaktion wird angenommen, daß der Wirkungsquerschnitt des Zweielektronentransfers für kleine Stoßenergien nahezu konstant ist und damit folgende Näherung gilt:

$$R_{\text{trans}} = \langle \sigma_{\text{trans}} (v_{\text{ArIII}} - v_{\text{CuI}}) * (v_{\text{ArIII}} - v_{\text{CuI}}) \rangle$$

$$\approx \sigma_{\text{trans}} * (v_{\text{ArIII}} - v_{\text{CuI}}) \quad (110)$$

Nimmt man als Ionenenergie $kT_1 \approx 3$ eV an, wie sie in einer vergleichbaren Entladung gemessen wurde (Köhler et al 1987), so erhält man als Mittelwert des Wirkungsquerschnitts Werte zwischen $2.62 * 10^{-14} \text{ cm}^2$ und $5.24 * 10^{-14} \text{ cm}^2$, bei Annahme einer Ionenenergie von 15 eV (Marlinghaus 1985) Werte zwischen $1.17 * 10^{-14} \text{ cm}^2$ und $2.34 * 10^{-14} \text{ cm}^2$. Der theoretische maximale Wirkungsquerschnitt für den Zweielektronentransfer beträgt $5.69 * 10^{-15} \text{ cm}^2$, ist also um den Faktor 2 - 4 kleiner als der abgeschätzte Wirkungsquerschnitt.

4.5 FEHLERBETRACHTUNG UND AUSBLICK

Bei der Bestimmung des Transferratenkoeffizienten und der Abschätzung von Wirkungsquerschnitten machen sich die Fehler atomarer Übergangswahrscheinlichkeiten A_{ji} in vielfältiger Weise bemerkbar. Zum einen wurden die Ionendichten (z. B. n_{ArIII}) und damit die Elektronendichte n_e aus Linienintensitäten ermittelt, andererseits gehen Elektronenstoßanregungs-Ratenkoeffizienten verschiedener Übergänge in die Gleichung zur Bestimmung von R_{trans} ein. Der prozentuale Fehler der Übergangswahrscheinlichkeiten beträgt bei den meisten publizierten atomaren Übergängen im ArI und CuI in der Regel 25 % und ist nur im Ausnahmefall des Überganges vom Zustand CuI 4p in den Grundzustand etwas kleiner (10 %).

Der Fehler der Nachweiswahrscheinlichkeit ϵ des VUV-Spektrographen liegt im Wellenlängenbereich um 324 nm und 80 nm bei 10 %, während er zwischen 80 nm und 90 nm sowie 100 nm und 120 nm bei 30 % liegt. Da die ArIII-Ionendichte durch Messungen von Linien bestimmt wurden, die zwischen 87.1 nm und 88.7 nm lagen, kann für n_{ArIII} ein Fehler von ca. 45 % veranschlagt werden, wobei die Ungenauigkeit der Übergangswahrscheinlichkeiten schon mitberücksichtigt wurde (Marlinghaus 1985).

Eine Verbesserung der Genauigkeit der Nachweiswahrscheinlichkeit des Spektrometers für die kritischen Bereiche zwischen 80 nm und 90 nm sowie 100 nm und 120 nm könnte mit Hilfe einer Elektronenstoßquelle erreicht werden, die zwischen Resonator und Monochromator fest installiert wird. Mit dieser Quelle als Transferstandard wäre außerdem eine ständige Überprüfung der Nachweiswahrscheinlichkeit auch während des normalen Meßbetriebs möglich (Pöffel 1986).

Der prozentuale Fehler der Elektronendichte n_e entspricht wegen der Quasineutralitätsbedingung des Plasmas im wesentlichen dem der ArII-Dichte und beträgt damit max. 35 %, was in erster Linie erneut auf die Ungenauigkeit der tabellierten Werte der Übergangswahrscheinlichkeiten zurückzuführen ist.

Alternative Möglichkeiten zur Elektronendichtemessung sind am vorliegenden EZR-Plasma jedoch ohne weiteres nicht möglich: Langmuir-Sonden würden bei den vorliegenden Elektronentemperaturen an der Oberfläche verdampfen und bei instabilen Plasmaverhältnissen mit Kupfer beschichtet werden. Für die Bestimmung der Elektronendichte durch Messung der Linienverbreiterung ist die Dichte wiederum um ca. 4 Größenordnungen zu klein (Wiese 1965). Die Genauigkeit der Dichtebestimmung durch Messung der Elektronenverteilungsfunktion mit Hilfe einer Zweifachgegenfeldsonde ist noch nicht bekannt.

Bei der Berechnung der Elektronenstoßanregungs-Ratenkoeffizienten gehen wie auch bei den schon erwähnten Größen die Fehler der Übergangswahrscheinlichkeitsdaten linear ein. Bei der Wirkungsquerschnittsberechnung von Übergängen mit bekannten Übergangswahrscheinlichkeiten war die Abweichung der berechneten Werte von experimentell bestimmten meist kleiner als der Fehler der Übergangswahrscheinlichkeiten selber (s. Abschnitt 2.2.3.2). Für Übergänge, bei denen die A_{ji} -Werte abgeschätzt werden mußten, wurde jedoch ein prozentualer Fehler von 25% angenommen (s. Abschnitt 2.2.2).

Die Abweichung des experimentell bestimmten Transferwirkungsquerschnitts vom theoretischen maximalen Wert läßt sich ebenso mit der Ungenauigkeit atomarer Daten erklären. Die Größe des Transferratenkoeffizienten hängt offensichtlich stark von der Berücksichtigung der Kaskadenterme $4p \rightarrow 4s [3/2]^o$ ab.

Da aber von keinem Übergang der 4p-Niveaus in den Grundzustand Übergangswahrscheinlichkeiten bekannt sind, ist eine Skalierung dieser Übergangswahrscheinlichkeiten wie bei den $ns[3/2]^o$ - und $nd[3/2]^o$ -Zuständen (s. Abschnitt 2.2.2) nicht möglich, so daß der Fehler möglicherweise noch größer als 25 % wird.

Gegen all diese Fehler sind die Zählratenfehler aufgrund zeitlicher Veränderung des Plasmas gering: bei der CuI-Linie lagen sie typisch bei 4 %, bei den ArI-Linien zwischen 10 und 13 %.

Bei Berücksichtigung aller obengenannten Fehler kann man den absoluten Fehler des Transferratenkoeffizienten R_{trans} mit einem Faktor 2 - 4 abschätzen. Die einzige echte experimentelle Alternative zur genaueren Bestimmung des Ratenkoeffizienten des beobachteten Transfers wäre ein Stoßexperiment mit Ar^{2+} -Ionenstrahl und Cu-Dampftarget. Der Ionenstrahl müßte jedoch gleichzeitig sehr intensiv und niederenergetisch sein und die Dichte des Kupferdampftargets müßte bekannt sein, was jedoch experimentell schwer zu realisieren ist. Der Nachweis der hochangeregten Zustände des neutralen Argons schließlich wäre auch bei dem direkten Stoßexperiment wiederum nur spektroskopisch möglich, so daß die Fehler der atomaren Übergangswahrscheinlichkeiten auch hier in die Bestimmung der Transfer-Ratenkoeffizienten eingehen. Für Stoßsysteme, in denen die atomaren Daten beider Stoßpartner besser bekannt sind, wird nach den obigen Überlegungen sicherlich die Bestimmung von Ionendichten, Zustandsbesetzungsdichten, Elektronenstoßanregungs- bzw. Transferratenkoeffizienten genauer werden.

5. ZUSAMMENFASSUNG

Mit Hilfe der VUV-Spektroskopie wurden an einer Argon-EZR-Entladung Ratenkoeffizienten von Zweielektronen-Transferreaktionen bestimmt, durch die hochangeregte ArI-Zustände selektiv besetzt werden. Diese Transferprozesse können in einem Neutralgas-Druckbereich zwischen $1.4 \cdot 10^{-3}$ Pa und $8 \cdot 10^{-3}$ Pa beobachtet werden. In diesem Druckbereich wird das instabile Plasma zur Kupfer-Resonatorwand getrieben, was zur Zerstäubung des Wandmaterials und zur Erhöhung des Kupfergehalts der Entladung führt. Parallel mit dem Anstieg der Kupferdichte wurde in diesem Druckbereich ein Intensitätsanstieg der ArI-Resonanzlinien bei 80.6 nm und 81.6 nm beobachtet, der auf eine selektive Besetzung der entsprechenden atomaren Zustände $6d/8s[3/2]^o$ und $5d/7s[3/2]^o$ durch einen Zweielektronentransfer zwischen neutralen Kupfer und ArIII hinweist.

Aus theoretischen Berechnungen mit einem erweiterten klassischen Modell erkennt man, daß besonders für die ArI-Zustände $6d/8s[3/2]^o$ eine selektive Besetzung durch einen korrelierten Zweielektronentransfer zwischen CuI und ArIII wahrscheinlicher als ein möglicher Einelektronen-Austauschprozeß zwischen CuI und ArII ist. Aus Rechnungen und Abschätzungen von Potentialkurven der Quasimoleküle $(ArCu)^{2+}$ kann man schließen, daß dieser Zweielektronenaustausch eher einstufig als zweistufig verlaufen kann.

Spektroskopische Messungen mit einem absolut kalibrierten Spektrometer zeigen, daß bei gepulster Entladung die Korrelation zwischen der Kupferdichte und der Besetzung der hochangeregten ArI-Zustände $6d/8s[3/2]^o$ und $5d/7s[3/2]^o$ nur im zeitlichen Mittel zu beobachten ist. Bei zeitaufgelösten Intensitätsmessungen dagegen erkennt man nur zwischen der ArI-Linie bei 80.6 nm und der Kupferdichte eine deutliche Korrelation. Aus hochaufgelösten Messungen wird deutlich, daß der ArI-Zustand $6d[3/2]^o$ zu ca. 70 % durch einen Zweielektronen-Transfer selektiv besetzt wird. Die Dichte dieses Zustandes erreicht nahezu die Dichte des energetisch viel tieferliegenden Zustandes $4s[3/2]^o$.

Aus den absolut gemessenen ArI- und CuI-Linienintensitäten schließlich wurden mit Hilfe eines modifizierten Koronamodells Ratenkoeffizienten R_{trans} für den Zweielektronentransfer $\text{Ar}^{2+} + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^*(6d) + \text{Cu}^{2+}$ bestimmt. Die darin eingehenden Elektronenstoßanregungs-Wirkungsquerschnitte wurden für kleinere Energien mit Hilfe einer semiempirischen Näherung und für höhere Energien mit einer Bethe-Näherung berechnet. Die angenommene Elektronenenergie-Verteilung hat die Form $F(E) \sim E^{-s}$ mit einem Spektralindex $1 < s < 2$. Die Ionendichten von ArIII und die Elektronendichten konnten aus vorhandenen Messungen der Ladungszustandsverteilung entnommen werden.

Der so ermittelte Ratenkoeffizient R_{trans} im Neutralgas-Druckbereich zwischen $1.4 \cdot 10^{-3}$ Pa und $8 \cdot 10^{-3}$ Pa liegt zwischen $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^{-3} \text{ s}^{-1}$ und $2 \cdot 10^{-14} \text{ m}^{-3} \text{ s}^{-1}$. Er ist nahezu unabhängig vom Neutralgasdruck und vom Spektralindex s der Elektronenenergie-Verteilungsfunktion. Bei angenommenen Ionenenergien von 3 eV - 15 eV liegt der Wirkungsquerschnitt für diesen Zweielektronen-Transfer damit zwischen $1.17 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2$ und $5.24 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2$, erreicht also sogar die Größenordnung typischer Wirkungsquerschnitte für Eielektronen-Transferprozesse.

6. LITERATURVERZEICHNIS

- Bernhardi, K., Wiesemann, K. (1982) Plasma Physics 24, 867
- Bernhardi, K., Brinkmann, H.P. (1988) SFB-Report 88-05-178
- Bethe, H. (1930) Ann. Phys. 5, 325
- Bezuglov, N.N., Gorshkov, V.N., Osherovich, A.L., Phethotkina, G.L. (1983)
Opt. Spectrosc. 53 (3), 239
- Blanke, H. (1988) private Mitteilungen
- Bohr, N., Lindhard, J. (1954) K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd. 28, 1
- Borozdin, V.S., Smirnov, Y.M., Sharonov, Y.D. (1977)
Opt. Spectrosc. (UdSSR) 43, 2, 227
- Carlsson, J. (1988) Phys. Rev. A 38, 4, 1702
- Carlsson, J., Dönszelmann, A., Lundberg, H., Persson, A., Stureson, L.,
Svanberg, S. (1987) Z. Phys. D 6, 125
- Cederquist, H., Mannervik, S., Kisielinski, M., Forsberg, P., Martinson, I.,
Curtis, L.J., Ramanujam, P.S. (1984) Phys. Scr. T8, 104
- Chibisov, M.I. (1976) Zh. Eksp. Teor. Fiz. 70, 1687
- Chibisov, M.I., Janev, R.K. (1988) Physics Reports 166, 1
- Chutjian, A., Cartwright, D.C. (1981) Phys. Rev. A 23, 2178
- van Dam, J.W. (1983) "Stability of Hot Electron Plasmas"
(Vortrag im Rahmen der "Varenna Summer School")
- Dandi, R.A., et al. (1974) Plasma Physics and Controlled Nuclear Fusion Research
Vol. 2, 141 (IAEA, Wien, 1975)
- Drake, R.P., Moos, H.W. (1980) Nuclear Fusion 20, 5, 599

- Fowler, T.K. (1981) "Mirror Theory" in "Fusion" Vol. 1, A, 291
Academic Press N.Y. (Hrsg. Teller, E.)
- Gilbert, D.A., et al. (1983) J. Phys. B 16, 81
- Grozdanov, T.P., Janev, R.K. (1980) J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 13, 3431
- Janev, R.K. (1976) Adv. At. Mol. Phys. 12, 1
- Jungen, M. (1981) Theor. Chim. Acta 60, 369
- Kato, T. (1977) "Ionization and Excitation of Ions by Electron Impact"
IPPJ - AM 2, Nagoya
- Katsonis, K., Drawin, H.W. (1980) J. Quant. Spectr. Radiat. Transfer 23, 1
- Kaufmann, K., et al. (1983) Chem. Phys. 79, 11
- Kelly, R.L. (1982) "Atomic and Ionic Spectrum Lines below 2000 Å."
Oak Ridge National Laboratory Report, No. 5922
- Komarov, I.V., Janev, R.K. (1966) Zh. Eksp. Teor. Fiz. 51, 1712
- Koslowski, H.R. (1988, a) private Mitteilungen
- Koslowski, H.R. (1988, b) Dissertation Bochum
- Krall, N.A., Trivelpiece, A.W. (1973) "Principles of Plasma Physics"
McGraw-Hill N.Y., App. 1.6
- Landau, L.D. (1932) Phys. Zeitschr. Sowjetunion 2, 46
- Li, G.P., et al. (1988) Phys. Rev. A 38, 3, 1240
- Mack, E.M. (1987) Dissertation Groningen
- Malakhov, Y.I. (1978) Opt. Spectrosc. 44 (2), 125
- Marlinghaus, E.H. (1984) Dissertation Bochum
- Marlinghaus, E.H. (1984) SFB-Report 84-05-120, 11
- Marlinghaus, E.H. (1985) SFB-Report 85-05-137, 39 u. 60

Marlinghaus, E.H., Huber, B.A., Wiesemann, K. (1983)

Ann. Israel Phys. Soc. 6, 94

McConkey, J.W., Donaldson, F.G. (1973) Can. J. Phys. 51, 914

McWhirter, R.W.P. (1965) in "Plasma Diagnostic Techniques"

(Hrsg. Huddleston, R.H., Leonard, S.L.) Academic Press, N.Y., London

Mentall, J.E., Morgan, H.D. (1976) Phys. Rev. A 14, 954

Migdalek, J. (1978) J. Quant. Spectr. Radiat. Transfer 20, 81

Migdalek, J., Baylis, W.E. (1978) J. Phys. B 11 (17), L 497

Moiseiwitsch, B.L. (1968) Reviews of Modern Physics 40, 2, 238

Nicholis, R.W., Stewart, A.L. (1962) in "Atomic and Molecular Processes"

(Hrsg. Bates, D.R.) Academic Press, N.Y.

Niehaus, A. (1986) J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 19, 2925

Osherovich, A.L., Plekhotkina, G.L., Obidin, V.R. (1981) Opt. Spectr. 50, 576

Olson, R.E., Salop, A. (1976) Phys. Rev. A 14, 579

Olson, R.E., Smith, F.T., Bauer, E. (1971) Appl. Opt. 10, 1848

Pöffel, W. (1986) Diplomarbeit Gießen

van Regemorter, H. (1962) Astrophys. J. 136, 3, 906

Ryufuku, H., Sasaki, K., Watanabe, T. (1980) Phys. Rev. A 21, 745

Schneider, M., Wiesemann, K. (1985) SFB-Report 85-05-139, 58

Seaton, M.J. (1962) in "Atomic and Molecular Processes"

(Hrsg. Bates, D.R.) Academic Press N.Y., 416

Sommerfeld, A. (1949) "Partial differential equations in physics"

Academic Press, N.Y.

Staemmler, V. (1985) private Mitteilungen, Bochum

Staemmler, V. (1988) private Mitteilungen, Bochum

- Stebbing, R.F., Dunning, F.B. (1983) "Rydberg States of Atoms and Molecules"
Cambridge University Press, Cambridge
- Stolterfoth, N., et al. (1986) Phys. Rev. Letters 57, 1, 74
- Stückelberg, E.C.G. (1932) Helv. Physica Acta 5, 369
- Uckan, N.A. & EBT Group (1983) Plasma Physics 25, 129
- Valvo-Katalog (1975) "Elektronenvervielfacher -Kanäle und -Kanalplatten"
8/73, 20
- Verolainen, Y.F., Plekhotkina, G.L., Privalov, V.I. (1983)
Opt. Spectrosc. 53 (6), 586
- Wagner, G. (1985) Diplomarbeit Bochum, 54
- Wagner, G. (1986) SFB-Report 86-05-146, 53
- Wagner, G., Ziemann, K., Wiesemann, K. (1986) SFB-Report 86-05-151
- Wiese, W.L. (1965) "Plasma Diagnostic Techniques"
(Hrsg. Huddleston, R.H., Leonard, S.L.) Academic Press N.Y., 314
- Wiese, W.L., Martin, G.A. (1980) "Wavelengths and Transition Probabilities for
Atoms and Atomic Ions" NSRDS-NBS 68, Washington
- Wiese, W.L., Smith, M.W., Miles, B.M. (1969) "Atomic Transition Probabilities"
Vol. II, NSRDS-NBS 22, Washington
- Zener, C. (1932) Proc. Roy. Soc. A 137, 696
- Ziemann, K. (1984) SFB-Report 84-05-122, 46

7. ABBILDUNGS- UND TABELLENVERZEICHNIS

Abb. 1:	Schematischer Potentialverlauf $V(x)$ beim Stoß eines Projektilions A^zA^+ mit einem Targetion B^zB^+ (klassisches Modell)	4
Abb. 2:	Reaktionsfenster eines Einelektronentransfers $Ar^+ + Cu \rightarrow Ar^* + Cu^+$ (ECB-Modell) für Stoßenergien zwischen 1 eV und 10 eV	11
Abb. 3:	Reaktionsfenster eines Einelektronentransfers $Ar^{2+} + Cu \rightarrow Ar^+ + Cu^{**}$ (ECB-Modell) für Stoßenergien zwischen 1 eV und 10 eV	12
Abb. 4:	Reaktionsfenster eines Zweielektronentransfers $Ar^{2+} + Cu \rightarrow Ar^* + Cu^{2+}$ (ECB-Modell) für Stoßenergien zwischen 1 eV und 10 eV	13
Abb. 5:	Schematischer zeitlicher Ablauf eines Zweielektronentransfers $Ar^{2+} + Cu \rightarrow Ar^* + Cu^{2+}$ (ECB-Modell)	14 - 16
Abb. 6:	Adiabatische und diabatische Potentialkurven in einem Zweizustandssystem	20
Abb. 7:	Landau-Zener-Übergangswahrscheinlichkeit $p(R)$ für einen Einelektronen-Transferprozeß $Ar^{2+} + Cu \rightarrow Ar^+ + Cu^{**} (3d^9 7s)$	23
Abb. 8:	Übergangsmatrixelemente $H_{12}(R)$ für einen Einelektronentransfer $Ar^{2+} + Cu \rightarrow Ar^+ + Cu^{**} (3d^9 7s)$ und für einen Zweielektronentransfer $Ar^{2+} + Cu \rightarrow Ar^* (6d) + Cu^{2+}$	27
Abb. 9:	Potentialkurven der Systeme $(Ar^{2+} Cu)$ und $(Ar^* Cu^{2+})$	31
Abb. 10:	Bevölkerungs- und Entvölkerungsmechanismen des Zustandes j des Ions A^{z+}	34
Abb. 11:	Vereinfachtes Termschema für neutrales Kupfer	39

Abb. 12:	Vereinfachtes Termschema für neutrales Argon	42
Abb. 13:	Berechneter effektiver Gaunt-Faktor und Wirkungsquerschnitt für Elektronenstoßanregung des Zustandes $\text{Ar}^*(4s' [1/2]^0)$ aus dem Grundzustand	52
Abb. 14:	Berechneter effektiver Gaunt-Faktor und Wirkungsquerschnitt für Elektronenstoßanregung des Zustandes $\text{Cu}^*(4p^2 P_{3/2})$ aus dem Grundzustand	53
Abb. 15:	Bochumer Elektron-Zyklotron-Resonanz-Entladung mit VUV-Monochromator	62
Abb. 16:	Blockschaltbild der VUV-Diagnostik und Experimentsteuerung	64
Abb. 17:	Pulsdiagramm für zeitaufgelöste VUV-Spektroskopie	65
Abb. 18:	Mikrowellen-Einkopplungsgüte $P_{\text{ref}} / P_{\text{in}}$ in Abhängigkeit vom Neutralgasdruck p	70
Abb. 19:	Druckabhängigkeit der Intensität der CuI-Resonanzlinie 324.75 nm bei gepulster Entladung und Dauerstrichentladung	72
Abb. 20:	VUV-Spektrum der EZR-Entladung zwischen 80 nm und 87 nm	73
Abb. 21:	Druckabhängigkeit der Intensität der ArI-Resonanzlinie 106.6 nm bei gepulster Entladung	74
Abb. 22:	Druckabhängigkeit der Elektronendichte einer Argon-Dauerstrichentladung	75
Abb. 23:	Druckabhängigkeit der Intensität der ArI-Resonanzlinien 81.6 nm und 80.6 nm bei gepulster Entladung	76
Abb. 24:	Zeitliche Entwicklung von ArI- und CuI-Linienintensitäten bei $p = 2.5 \cdot 10^{-3}$ Pa	78
Abb. 25:	Zeitliche Entwicklung von ArI- und CuI-Linienintensitäten bei $p = 5 \cdot 10^{-3}$ Pa	79

Abb. 26:	Zeitliche Entwicklung von ArI- und CuI-Linienintensitäten bei $p = 5.6 \cdot 10^{-3}$ Pa	80
Abb. 27:	Zeitliche Entwicklung von ArI- und CuI-Linienintensitäten bei $p = 6.6 \cdot 10^{-3}$ Pa	81
Abb. 28:	Zeitliche Entwicklung von ArI- und CuI-Linienintensitäten bei $p = 8.85 \cdot 10^{-3}$ Pa	82
Abb. 29:	Druckabhängigkeit der Intensität der ArI-Resonanzlinie 80.64711 nm bei Dauerstrichentladung	85
Abb. 30:	Druckabhängigkeit der Intensität der ArI-Resonanzlinie 80.68689 nm bei Dauerstrichentladung	85
Abb. 31:	Verhältnis der Besetzungsdichten der ArI-Zustände $6d \left[\frac{3}{2} \right]^o$ zu $4s \left[\frac{3}{2} \right]^o$	86
Abb. 32:	Anteil der Elektronenstoßanregung aus dem Grundzustand auf die Besetzung des ArI-Zustandes $6d \left[\frac{3}{2} \right]^o$	89
Abb. 33:	Anteil der Elektronenstoßanregung aus dem Grundzustand auf die Besetzung des ArI-Zustandes $8s \left[\frac{3}{2} \right]^o$	89
Abb. 34:	Ratenkoeffizient für den Zweielektronentransfer $\text{Ar}^{2+} + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^* (6d) + \text{Cu}^{2+}$ ohne Berücksichtigung von Kaskadenkorrekturen	92
Abb. 35:	Ratenkoeffizient für den Zweielektronentransfer $\text{Ar}^{2+} + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^* (6d) + \text{Cu}^{2+}$ unter Berücksichtigung von Kaskadenkorrekturen	92

Tab. 1:	Kernabstände klassisch erlaubter Einelektronenübergänge	6
Tab. 2:	Energiedefekte von Stoßreaktionen $\text{Ar}^+ + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar}^* + \text{Cu}^+$	10
Tab. 3:	Atomare Daten hochangeregter, Rydberg-ähnlicher ArI-Zustände	30
Tab. 4:	Übergangswahrscheinlichkeiten A_{ji} für atomare Übergänge im neutralen Kupfer	40
Tab. 5:	Übergangswahrscheinlichkeiten A_{ji} für atomare Übergänge im neutralen Argon	44 - 47
Tab. 6:	Vergleich der Entvölkerungsmechanismen verschiedener angeregter Zustände in CuI und ArI	56
Tab. 7:	Vergleich der Bevölkerungsmechanismen verschiedener angeregter Zustände in CuI und ArI	57
Tab. 8:	Übergangswahrscheinlichkeiten für atomare Übergänge von verschiedenen angeregten Zuständen in CuI und ArI in tieferliegende Zustände und in den Grundzustand	59

Ich danke Herrn Prof. K. Wiesemann für die Betreuung dieser Arbeit.

Den Herren Prof. B.A. Huber und Dr. H.R. Koslowski gilt mein Dank für viele hilfreiche Diskussionen.

Bei Herrn Prof. V. Staemmler möchte ich mich für die Berechnungen von Potentialkurven sowie für zahlreiche klärende Gespräche bedanken.

Mein besonderer Dank gilt auch Herrn N. Grabkowski für hervorragende technische Betreuung, sowie für das Anfertigen der technischen Zeichnungen und die Wartung des Experimentes.

Nicht zuletzt möchte ich mich bei Herrn B. Klawonn für kreative Mithilfe bei der Erstellung der Rechenprogramme bedanken.

LEBENS LAUF:

Name: Martin Jogwich

Geburtstag,
Geburtsort: 6. Juni 1958 in Essen

Familienstand: verheiratet, 1 Kind

Schul Ausbildung: 1964-1968 Grundschule in Essen
1968-1977 Gymnasium in Essen, 1977 Abitur

Hochschulausbildung: 1977-1984 Physikstudium an der Universität Essen GHS,
Diplomprüfung im Dezember 1984

berufliche Tätigkeit: seit 1985 wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für
Experimentalphysik / AG Gaselektronik
der Ruhr-Universität Bochum

